



ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO

FACULTAD DE CIENCIAS

CARRERA INGENIERÍA QUÍMICA

**DESARROLLO DE UNA RNA PARA EL CONTROL DE LA
DESTILACIÓN EXTRACTIVA ASISTIDA POR RECOMPRESIÓN
DE VAPOR PARA LA SEPARACIÓN DE N-HEXANO Y ACETATO
DE ETILO**

Trabajo de Integración Curricular

Tipo: Proyecto Técnico

Presentado para optar al grado académico de:

INGENIERA QUÍMICA

AUTORA: DENISSE YAJAIRA CHICAIZA SAGAL

DIRECTOR: Ing. DANIEL ANTONIO CHUQUÍN VASCO, Mgs.

Riobamba – Ecuador

2023

© 2023, Denisse Yajaira Chicaiza Sagal

Se autoriza la reproducción total o parcial, con fines académicos, por cualquier medio o procedimiento, incluyendo la cita bibliográfica del documento, siempre y cuando se reconozca el Derecho de Autor.

Yo, Denisse Yajaira Chicaiza Sagal, declaro que el presente Trabajo de Integración Curricular es de mi autoría y los resultados del mismo son auténticos. Los textos en el documento que provienen de otras fuentes están debidamente citados y referenciados.

Como autora asumo la responsabilidad legal y académica de los contenidos de este Trabajo de Integración Curricular; el patrimonio intelectual pertenece a la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo.

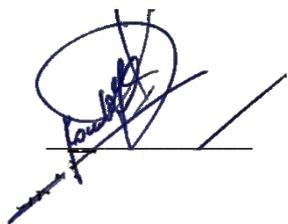
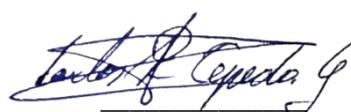
Riobamba, 13 de abril de 2023.



Denisse Yajaira Chicaiza Sagal
0550559488

ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO
FACULTAD DE CIENCIAS
CARRERA INGENIERÍA QUÍMICA

El Tribunal del Trabajo de Integración Curricular certifica que: El Trabajo de Integración Curricular; tipo: Proyecto Técnico, **DESARROLLO DE UNA RNA PARA EL CONTROL DE LA DESTILACIÓN EXTRACTIVA ASISTIDA POR RECOMPRESIÓN DE VAPOR PARA LA SEPARACIÓN DE N-HEXANO Y ACETATO DE ETILO**, realizado por la señorita: **DENISSE YAJAIRA CHICAIZA SAGAL**, ha sido minuciosamente revisado por los Miembros del Tribunal del Trabajo de Integración Curricular, el mismo que cumple con los requisitos científicos, técnicos, legales, en tal virtud el Tribunal Autoriza su presentación.

	FIRMA	FECHA
Ing. Camilo Pavel Haro Barroso, Mgs PRESIDENTE DEL TRIBUNAL		2023-04-13
Ing. Daniel Antonio Chuquin Vasco, MsC DIRECTOR DEL TRABAJO DE INTEGRACIÓN CURRICULAR		2023-04-13
Ing. Carlos Ramiro Cepeda Godoy, Mgs ASESOR DEL TRABAJO DE INTEGRACIÓN CURRICULAR		2023-04-13

DEDICATORIA

Dedico este trabajo a mis padres William y Nancy por el esfuerzo, paciencia y dedicación que han puesto en mí, gracias a su valioso apoyo y guía durante toda mi vida han permitido formar la persona que soy ahora, siempre tendrán mi mayor admiración por salir adelante a pesar de lo difícil que es la vida y dar lo mejor a sus hijos.

Denisse

AGRADECIMIENTO

Agradezco a mis hermanas por brindarme su apoyo incondicional me siento afortunada de haber crecido con dos hermandas que me han ayudado durante mi vida y han sabido entenderme en momentos difíciles. Gracias a mi abuelita por su tiempo y dedicación en mi crianza y amor brindado durante estos años y agradezco a mis buenos amigos que en estos años se han convertido en una segunda familia para mí acompañándome en mi trayecto. Asimismo, agradezco al Ing. Daniel Chuquín por la oportunidad, guía y motivación que me brindó para realizar el proyecto de integración curricular. Y finalmente, agradezco a la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo por abrirme sus puertas para mi formación profesional.

Denisse

ÍNDICE DE CONTENIDO

ÍNDICE DE TABLAS.....	x
ÍNDICE DE ILUSTRACIONES.....	xi
ÍNDICE DE ANEXOS.....	xiii
RESUMEN.....	xiv
ABSTRACT.....	xv
INTRODUCCIÓN.....	1

CAPÍTULO I

1. DIAGNÓSTICO DEL PROBLEMA.....	2
1.1. Planteamiento del problema.....	2
1.2. Justificación.....	3
1.3. Objetivos.....	4
1.3.1. <i>Objetivo general</i>	4
1.3.2. <i>Objetivos específicos</i>	4

CAPÍTULO II

2. MARCO TEÓRICO.....	5
2.1. Antecedentes de la investigación.....	5
2.1.1. <i>Simulación de procesos de destilación para mezclas azeotrópicas</i>	5
2.1.2. <i>Simulación de procesos de destilación para sistema de n-hexano y acetato de etilo</i>	9
2.2. Referencias teóricas.....	10
2.2.1. <i>Componentes</i>	10
2.2.1.1. <i>Acetato de etilo (AcEt)</i>	10
2.2.1.2. <i>N-hexano</i>	10
2.2.2. <i>Compuestos azeotrópicos</i>	11
2.2.3. <i>Destilación</i>	11
2.2.3.1. <i>Destilación extractiva</i>	11
2.2.4. <i>Simulador de procesos químicos</i>	12
2.2.4.1. <i>ASPEN PLUS</i>	12
2.2.4.2. <i>CHEMCAD</i>	13
2.2.4.3. <i>DWSIM</i>	13

2.2.4.4.	<i>HYSYS</i>	13
2.2.5.	Red Neuronal Artificial	14
2.2.5.1.	<i>Elementos básicos de una RNA</i>	14
2.2.6.	Plataforma de programación	15
2.2.6.1.	<i>SCILAB</i>	15
2.2.6.2.	<i>MATLAB</i>	15
2.2.6.3.	<i>LABVIEW</i>	15

CAPÍTULO III

3.	MARCO METODOLÓGICO	16
3.1.	Ingeniería del proyecto	16
3.1.1.	<i>Descripción del proceso</i>	17
3.1.2.	<i>Parámetros de funcionamiento</i>	18
3.1.2.1.	<i>Condiciones operativas del proceso</i>	18
3.1.3.	<i>Simulación en el simulador de procesos químicos</i>	20
3.1.3.1.	<i>Esquema metodológico de la simulación</i>	21
3.1.3.2.	<i>Seleccionar compuestos químicos y paquete termodinámico</i>	21
3.1.3.3.	<i>Diseño de flowsheet</i>	21
3.1.3.4.	<i>Configurar condiciones operativas</i>	23
3.1.4.	<i>Análisis de sensibilidad</i>	25
3.1.5.	<i>Tratamiento de datos</i>	26
3.1.6.	Creación de la ARN en la plataforma de programación	27
3.1.6.1.	<i>Esquema metodológico general para la creación de la ARN</i>	28
3.1.7.	<i>Entrenamiento de la ARN</i>	29
3.1.8.	<i>Validar los resultados de la ARN</i>	30
3.1.9.	<i>Análisis estadístico</i>	31

CAPÍTULO IV

4.	MARCO DE ANÁLISIS E INTERPRETACIÓN DE RESULTADOS	32
4.1.	Resultados de la simulación en DWSIM	32
4.2.	Validación de los resultados obtenidos en la simulación	34
4.3.	Balance de masa del sistema	35
4.3.1.	<i>Balance de masa en la torre de destilación extractiva</i>	35
4.3.2.	<i>Balance de masa en la torre extractiva de recuperación de solvente</i>	38

4.4.	Resultados del análisis de sensibilidad	40
4.4.1.	<i>Resultados del análisis de sensibilidad en la columna de Destilación extractiva</i>	41
4.4.1.1.	<i>Resultados del análisis 1</i>	41
4.4.1.2.	<i>Resultados del análisis 2</i>	42
4.4.1.3.	<i>Resultados del análisis 3</i>	43
4.4.1.4.	<i>Resultados del análisis 4</i>	43
4.4.2.	<i>Resultados del análisis de sensibilidad en la columna de recuperación</i>	44
4.4.2.1.	<i>Resultados del análisis 5</i>	45
4.4.2.2.	<i>Resultados del análisis 6</i>	45
4.4.2.3.	<i>Resultados del análisis 7</i>	46
4.5.	Resultados del entrenamiento de la ARN	47
4.5.1.	<i>Elección y desempeño de la ARN</i>	49
4.5.2.	<i>Resultados de predicción de datos de salida de la ARN</i>	51
4.6.	Resultados de la validación externa	54
4.7.	Resultados del análisis estadístico en STATGRAPHICS Centurion XIX	56
4.8.	Análisis de optimización del proceso	58

CAPÍTULO V

5.	CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES	60
5.1.	Conclusiones	60
5.2.	Recomendaciones	61

BIBLIOGRAFÍA

ANEXOS

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1-3: Condiciones de entrada.....	19
Tabla 2-3: Condiciones de funcionamiento de la columna extractiva EDC.	19
Tabla 3-3: Condiciones de funcionamiento de la columna recuperación ER.	20
Tabla 4-3: Condiciones de funcionamiento del compresor.....	20
Tabla 5-3: Factores para el análisis de sensibilidad.....	26
Tabla 6-3: Variables seleccionadas de entrada a la RNA	27
Tabla 7-3: Variables de salida entrenadas por RNA.....	27
Tabla 1-4: Resultados obtenidos de las corrientes en DWSIM.....	34
Tabla 2-4: Resultados del funcionamiento del compresor obtenidos en DWSIM.....	34
Tabla 3-4: Validación de los resultados obtenidos en DWSIM.....	35
Tabla 4-4: Variables empleadas en el análisis de sensibilidad	40
Tabla 5-4: Análisis de sensibilidad para la Columna de Destilación Extractiva	41
Tabla 6-4: Análisis de sensibilidad para la Columna Extractiva de recuperación	44
Tabla 7-4: Resultados del entrenamiento de la ARN.....	47
Tabla 8-4: Resultados del entrenamiento de la ARN.....	47
Tabla 9-4: Error cuadrático medio de la ARN diseñada	50
Tabla 10-4: Resultados del análisis estadístico usando STATGRAPHICS	57
Tabla 11-4: Resultados de los experimentos que proporcionan valores altos de pureza de las fracciones de interés	59

ÍNDICE DE ILUSTRACIONES

Ilustración 1-2:	Proceso de destilación extractiva	12
Ilustración 2-2:	Esquema de una Red Neuronal conectada	14
Ilustración 1-3:	Metodología para el desarrollo de la RNA	16
Ilustración 2-3:	Diagrama de flujo de destilación extractiva asistida recompresión de vapor	17
Ilustración 3-3:	Esquema metodológico de la simulación del proceso de destilación Extractiva asistida por recompresión de vapor.	21
Ilustración 4-3:	Simulación del proceso de destilación extractiva asistida por recompresión de vapor para la separación de n-hexano y acetato de etilo.	22
Ilustración 5-3:	Propiedades termodinámicas de la torre EDC	23
Ilustración 6-3:	Operación de la columna de destilación extractiva.....	24
Ilustración 7-3:	Condiciones de operación de presiones en EDC.	24
Ilustración 8-3:	Especificaciones de funcionamiento en EDC.	25
Ilustración 9-3:	Esquema metodológico para la creación y validación de la ARN	28
Ilustración 10-3:	Tabla de datos como vectores	29
Ilustración 11-3:	Porcentaje usado para el entrenamiento, validación y prueba y número de neuronas ocultas	30
Ilustración 1-4:	Simulación final del proceso de destilación extractiva para la separación de n-hexano y acetato de etilo	32
Ilustración 2-4:	Resultados obtenidos de las corrientes de entrada y salida.....	33
Ilustración 3-4:	Diagrama de la columna de destilación extractiva para balance de masa.....	35
Ilustración 4-4:	Diagrama de la columna de recuperación para balance de masa	38
Ilustración 5-4:	Resultados del análisis de sensibilidad 1	42
Ilustración 6-4:	Resultados del análisis de sensibilidad 2	42
Ilustración 7-4:	Resultados del análisis de sensibilidad 3	43
Ilustración 8-4:	Resultados del análisis de sensibilidad 4	44
Ilustración 9-4:	Resultados del análisis de sensibilidad 5	45
Ilustración 10-4:	Resultados del análisis de sensibilidad 6	46
Ilustración 11-4:	Resultados del análisis de sensibilidad 7	46
Ilustración 12-4:	Comparación de algoritmos en base a R y MSE.....	49
Ilustración 13-4:	Coefficiente de regresión R para el entrenamiento y prueba de la ARN	50
Ilustración 14-4:	Rendimiento del entrenamiento de la ARN por MSE.....	51
Ilustración 15-4:	Comparación de los resultados en DWSIM (reales) y ARN (predichos) en la columna de destilación extractiva para obtener N-hexano.....	52

Ilustración 16-4: Comparación de los resultados en DWSIM (reales) y ARN (predichos) en la columna de destilación extractiva para obtener NMP.....	52
Ilustración 17-4: Comparación de los resultados en DWSIM (reales) y ARN (predichos) en la columna de recuperación para obtener AcEt.....	53
Ilustración 18-4: Comparación de los resultados en DWSIM (reales) y ARN (predichos) en la columna de recuperación para obtener NMP	53
Ilustración 19-4: Fracción molar de N-hexano en la validación	54
Ilustración 20-4: Fracción molar de NMP como producto de fondo en EDC en la validación	55
Ilustración 21-4: Fracción molar de Acetato de etilo en la validación.....	55
Ilustración 22-4: Fracción molar de NMP como producto de fondo en ERC en la validación	56
Ilustración 23-4: Valor óptimo de la fracción molar de N-hexano.....	58

ÍNDICE DE ANEXOS

ANEXO A: BASE DE DATOS EMPLEADAS EN EL ENTRENAMIENTO DE LA ARN

ANEXO B: CÓDIGO PARA EL DISEÑO DE LA ARN EN MATLAB

ANEXO C: CÓDIGO PARA LA VALIDACIÓN DE LA ARN EN MATLAB

ANEXO D: CÓDIGO PARA EL ANÁLISIS GRÁFICO

ANEXO E: RESULTADOS DEL ERROR PORCENTUAL EN LA PREDICCIÓN

ANEXO F: RESULTADOS DEL ERROR PORCENTUAL EN LA VALIDACIÓN

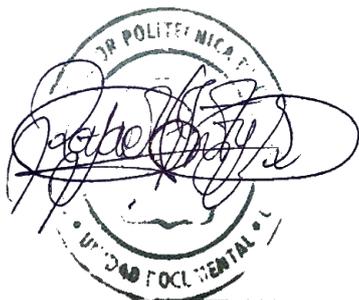
ANEXO G: RESULTADOS DEL ANÁLISIS ANOVA

RESUMEN

El n-hexano y Acetato de etilo son disolventes orgánicos muy requeridos en la industria química, sin embargo, el principal problema se encuentra cuando forman azeótropos de ebullición mínima, los cuales no pueden ser separados usando destilación simple, una alternativa efectiva es emplear destilación extractiva, no obstante, este proceso consume grandes cantidades de energía, por lo que, el objetivo principal consistió en implementar una bomba de recompresión de vapor al proceso de destilación extractiva para mejorar la eficiencia energética del proceso y permitir la separación de estos compuestos en componentes puros, mediante una plataforma de simulación, para posteriormente predecir las fracciones molares de N- hexano y Acetato de Etilo mediante una Red Neuronal Artificial. Como primer paso de la metodología se simuló el proceso en DWSIM, seguido, se generó una base de datos dispuesta en cuatros entradas; temperatura del flujo de alimentación, flujos másicos de alimentación y reposición en la torre de destilación extractiva (EDC) y ratio de reflujo en la torre de recuperación (ERC) y cuatro salidas correspondientes a los productos destilados; N-hexano (Destilado de EDC), NMP (fondo de EDC), Acetato de etilo (Destilado de ERC) y NMP (fondo de ERC) para la creación y entrenamiento ARN usando MATLAB, se compararon los rendimientos de los algoritmos y se eligió el más adecuado de acuerdo a las pruebas estadísticas de error cuadrático (MSE) y Regresión Lineal (R). Los resultados de simulación presentan un error promedio porcentual del 3.18%, además para el algoritmo Bayesian Regularization (BR) se obtuvo resultados de $MSE=2.5696E-07$ y $R=0.99397$. En tal contexto se concluye que los porcentajes de error obtenidos no superan el 10%, lo que indica que la simulación es adecuada para el proceso y el modelo construido es capaz de predecir las fracciones molares en estudio con un error promedio del 0.93%.

Palabras clave: <RED NEURONAL ARTIFICIAL (RNA)>, <DESTILACIÓN EXTRACTIVA>, <BOMBA DE RECOMPRESIÓN DE VAPOR >, <AZEÓTROPOS>, <SIMULACIÓN>.

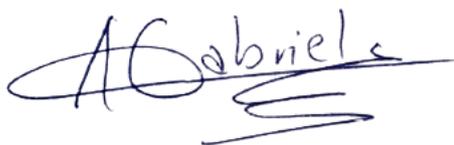
0763-DBRA-UTP-2023



ABSTRACT

The n-hexane and ethyl acetate are very required organic solvents in the chemical industry, however, the main problem is when they form azeotropes of minimum boiling, which cannot be separated using a simple distillation, an effective alternative is to use extractive distillation, however, this process consumes large amounts of energy, therefore, the main objective was to implement a steam recompression pump to the extractive distillation process to improve the energy efficiency of the process and allow the separation of these compounds into pure components, using a simulation platform to subsequently predict the mole fractions of N-Hexane and Ethyl Acetate by means of an Artificial Neural Network. As a first step of the methodology, the process was simulated in DWSIM, followed by the generation of a database arranged in four inputs; feed flow temperature, feed and make-up mass flows in the extractive distillation tower (EDC) and reflux ratio in the recovery tower (ERC) and four outputs corresponding to the distilled products: N-hexane (EDC distillate), NMP (EDC background), Ethyl acetate (ERC distillate) and NMP (ERC background) for RNA creation and training using MATLAB, the performances of the algorithms were compared and the most suitable one was chosen according to the statistical tests of quadratic error (MSE) and Linear Regression (R). The simulation results show an average percentage error of 3.18%, and for the Bayesian Regularization (BR) algorithm, results of $MSE=2.5696E-07$ and $R=0.99397$ were obtained. In such context it is concluded that the obtained error percentages do not exceed 10%, which indicates that the simulation is adequate for the process and the constructed model is able to predict the mole fractions under study with an average error of 0.93%.

Keywords: <ARTIFICIAL NEURON NETWORK (ANN)>, <EXTRACTIVE DISTILLATION>, <VAPOR RECOMPRESSION PUMP>, <AZEOTROPS>, <SIMULATION>.



Abg. Ana Gabriela Reinoso. Mgs.
Ced: 1103696132

INTRODUCCIÓN

El n-hexano y acetato de etilo son disolventes orgánicos muy empleados en la industria química y farmacéutica, sin embargo, el problema principal es la separación de estos componentes cuando se encuentran en forma de mezcla, ya que estos compuestos forman un azeótropo homogéneo, y para la separación de mezclas azeotrópicas se suelen usar diferentes estrategias no convencionales de separación como la destilación extractiva (ED) y la destilación por presión (PSD). Además, la ED se ha considerado como una alternativa predominante para la separación de mezclas con azeótropos de baja volatilidad por adicionar un agente de arrastre para romper estos azeótropos. En términos económicos y coste total anual (TAC) de ambas tecnologías depende de factores para la elección de la tecnología más adecuada, por ejemplo, para el proceso ED depende del sistema de azeótropos, ya que, se puede encontrar un buen arrastrados para separar las mezclas, en cambio, para el proceso de PSD depende significativamente de la sensibilidad a la presión del azeótropo en cuestión. Sin embargo, la ED es un proceso que consume gran cantidad de energía para regenerar el arrastrador, el cual puede reducirse si se opera la columna de recuperación de arrastre al vacío o a su vez se implementa una bomba de calor de recompresión de calor latente de condensación que se libera en el condensador en donde se elimina agua de refrigeración como calor residual para suministrar energía térmica al rehornador. Además, las aguas residuales que suponen la producción de estos compuestos químicos además que generan daños ambientales al descargarse directamente provocan aumento en el TAC. Por lo tanto, es atractivo separar mezclas de sistemas conformados por N-hexano y acetato de etilo empleando una nueva tecnología de ED asistida por recompresión de vapor, ya que en sistemas convencionales es muy difícil conseguir la separación de los azeótropos formados.

Por otra parte, la simulación de procesos químicos logra grandes beneficios para las industrias ya que permite estudiar previamente los procesos que se pretenden implementar, escalar los procesos industriales y probar los diseños antes de la puesta en marcha y combinada con el diseño y entrenamiento de redes neuronales artificiales permiten obtener un estudio completo del proceso químico, bien sea para analizar las diferentes condiciones en las que se encuentra operando el proceso o para conocer la respuesta al cambio de factores operativos.

CAPÍTULO I

1. DIAGNÓSTICO DEL PROBLEMA

1.1. Planteamiento del problema

El acetato de etilo y n-hexano son disolventes orgánicos muy empleados en la industria química y farmacéutica, no obstante, el principal problema se encuentra en la separación de sus mezclas, ya que, estos dos compuestos forman un azeótropo de ebullición mínima que presenta 65,7 mol% de n-hexano a condiciones de 1 atm y 64,85 °C que resulta muy difícil de separar (Feng et al. 2020, p. 1). Estos compuestos no pueden ser separados en componentes puros utilizando destilación simple, por lo tanto, una alternativa efectiva para la separación de estos compuestos es la destilación extractiva, que consiste en la adición de un tercer componente conocido como solvente a una mezcla binaria que puede o no presentar comportamiento azeotrópico para modificar la volatilidad relativa de los componentes de la mezcla, dicho solvente puede ser miscible en uno o ambos componentes de la mezcla o a su vez presentar un punto de ebullición elevado, y debe ser químicamente semejante a los componentes de la mezcla, por otro lado, seleccionar el tipo de agente de arrastre es de gran importancia debido a que la efectividad de separación depende de las interacciones entre la mezcla azeotrópica y el solvente (Segovia 2016, p. 12).

En tal sentido para la separación de mezclas azeotrópicas se usan diferentes estrategias de separación no convencionales como la destilación extractiva (ED) y la destilación por presión (PSD). En términos de economía y coste total anual (TAC), entre ambas tecnologías la ED suele ser mejor para sistemas acetona-metanol, acetona-cloroformo o mezclas de diclorometano-metanol, no obstante, la PSD suele ser más económica en comparación de la ED al tratarse de mezclas etanol-tetrahidrofurano, acetonitrilo-n-propanol y alcohol isopropílico-éter diisopropílico (Feng et al. 2020, p. 2).

Por otro lado, la ED es un proceso que requiere de gran cantidad de energía para regenerar el arrastrador, el consumo de energía puede reducirse al operar la columna de recuperación de arrastre al vacío e implementando una bomba de calor de recompresión de vapor para mejorar la eficiencia energética ya que mejora el calor latente de condensación que se libera en el condensador y además existe eliminación de agua de refrigeración como calor residual usado para suministrar energía térmica al rehervidor (Yang, Sun, et al. 2019, p. 5). Para sistemas conformados por mezclas de n-hexano y acetato de etilo no se han realizado suficientes estudios empleando como alternativa de separación no convencional la destilación extractiva, siendo un aspecto relevante considerable en el control dinámico del proceso. Por tanto, el estudio se centra en la validación y simulación del proceso de destilación extractiva para separar eficazmente la mezcla de n-hexano

y acetato de etilo empleando N-metil-2 pirrolidona (NMP) como agente de arrastre y mejorando la eficiencia térmica del proceso mediante una bomba de calor de recompresión de vapor (VRHP), mediante una multiplataforma para simulación de procesos químicos, cuyos resultados de simulación serán contrastados entre el sistema de destilación extractiva y valores de modelación del sistema provenientes de un referente bibliográfico para su validación, seguido se generará una base de datos mediante un sistema de cómputo numérico para el diseño de una Red Neuronal Artificial (RNA), la cual debe ser capaz de predecir las fracciones molares de los compuestos de interés en las columnas de destilación extractiva y de recuperación.

1.2. Justificación

A lo largo de los años las industrias de procesos químicos se enfrentan a desafíos en términos de economía global, condiciones de mercado y presión competitiva para reducir el tiempo y mejorar la calidad de productos y procesos, estas empresas deben reducir costos de capital y operativos, al mismo tiempo mejorar la eficiencia para optimizar el desempeño de la industria y maximizar su rentabilidad, por lo tanto, la simulación de procesos industriales es una herramienta tecnológica de gran impacto dentro de la industria química, la cual permite la recreación digital de procesos para realizar predicciones del comportamiento del sistema cuando se modifican diferentes variables ya sea para su desarrollo, análisis, diseño u optimización, es decir, se busca desarrollar un sistema donde se consiga obtener sustancias puras y a la vez los procesos supongan bajos consumos de energía y tiempos de ejecución para posteriormente implementarlos en plantas industriales con eficiencia, seguridad y menores costes de operación sin la necesidad de acudir a plantas pilotos que antiguamente se usaban para analizar su eficiencia (Ramírez 2005, p. 15).

Las aguas residuales aumentan el costo total anual, además, provocan daños ambientales si son descargadas directamente. Por lo tanto, es necesario y atractivo separar la mezcla de n-hexano y acetato de etilo e implementar procesos de reciclaje (Lü et al. 2018, p. 3). El proceso para la obtención de n-hexano y acetato de etilo mediante destilación extractiva asistida por recompresión de vapor es una nueva tecnología debido a que en sistemas convencionales de destilación es imposible la separación de azeótropos formados, de la misma manera, los procesos de destilación extractiva representan un excesivo gasto energético, por lo que, su economía también resulta muy elevada para su implementación, por lo tanto, se trata de reducir el consumo de energía implementando una bomba de calor por recompresión de vapor mediante la simulación del proceso y desarrollo de una RNA empleando como agente de arrastre N-metil-2-pirrolidona para lograr que el sistema sea eficiente y presente menores costos de inversión.

Por otra parte, el estudio y desarrollo de redes neuronales artificiales ha tenido un incremento considerable en los últimos años en los campos tecnológico y científico, las RNA tienen la

capacidad de imitar el funcionamiento biológico de las neuronas humanas, además, simplifican el método experimental debido a que es capaz de resolver problemas complejos cuando recibe un entrenamiento eficaz, el diseño de una RNA para la predicción de valores de salida en procesos de destilación extractiva aporta al estudio progresivo de estudiantes y profesionales relacionados con la industria de extracción de solventes. En tal motivo, se pretende simular un sistema de destilación extractiva con recompresión de vapor para la separación de una mezcla azeotrópica de n-hexano y acetato de etilo empleando NMP mediante un software de procesos químicos. Los resultados permitirán el diseño de una RNA que será entrenada y diseñada por medio de una plataforma de cálculo numérico y programación como herramienta confiable, dicha RNA será capaz de predecir la fracción molar de los componentes de estudio según los parámetros de funcionamiento.

1.3. Objetivos

1.3.1. Objetivo general

- Desarrollar una RNA para el control de la destilación extractiva asistida por recompresión de vapor para la separación de n-hexano y acetato de etilo.

1.3.2. Objetivos específicos

- Establecer los parámetros de funcionamiento del sistema de destilación extractiva asistida por recompresión de vapor.
- Validar la simulación del proceso de destilación extractiva asistida por recompresión de vapor mediante un referente bibliográfico de alta relevancia.
- Diseñar una RNA que permita predecir las fracciones molares de los productos de cada columna en el sistema de destilación propuesto a partir de las condiciones de funcionamiento.
- Validar el funcionamiento de la RNA mediante un análisis estadístico
- Realizar un análisis de optimización del proceso de ED asistida por recompresión de vapor

CAPÍTULO II

2. MARCO TEÓRICO

2.1. Antecedentes de la investigación

2.1.1. *Simulación de procesos de destilación para mezclas azeotrópicas*

La presencia de azeótropos en mezclas binarias no permiten que los componentes individuales se puedan separar de forma efectiva empleando técnicas convencionales de destilación (Yang Kong, Yeh Lee y Sunarso 2022, p. 4). Por tanto, se han generado diversas técnicas de destilación especiales como la destilación extractiva (ED), destilación por oscilación de presión (PSD), destilación azeotrópica (AD), destilación extractiva acoplada térmicamente (TCED), columnas de pared divisoria extractiva (EDWC), etc.

La ED se considera como una tecnología predominante para separar mezclas con azeótropos mediante un agente de arrastre. En general, el campo de la destilación extractiva ha mejorado mucho en los últimos veinte años, por destilación extractiva se pueden separar mezclas azeotrópicas de baja volatilidad relativa y se puede emplear cualquier tipo de agente de arrastre: ligero, pesado, de punto de ebullición intermedio, disolventes heterogéneos y homogéneos, líquido iónicos o disolventes eutécticos profundos (Gerbaud et al. 2019, p. 2). Iqbal, Ahmad y Ojasvi (2019, p. 147), exploraron diferentes métodos para la separación de mezclas: destilación por oscilación de presión (PSD), destilación extractiva (ED) y destilación azeotrópica (AD), concluyeron que el mejor método en términos de rendimiento económico es la ED, debido a que es un 27,62 % menor a la destilación por lotes con oscilación de presión en una mezcla binaria de diclorometano-metanol. Zhu et al., (2020, p. 19) concluyen de manera similar que ED puede separar componentes de mezclas etilo-ciclohexano de hasta el 99,99% en moles. Además, emplean un proceso adicional que consiste en un precalentamiento de dos etapas para mejorar la eficiencia en el empleo de energía para reducción de costos, demostrando que el TAC del proceso de ED es 58,2% más bajo que PSD y del proceso de dos etapas, este estudio centra el enfoque en establecer una separación eficiente para un sistema de acetato de etilo y ciclohexano importante para las industrias plaguicidas. En cambio, Qin et al., (2022, p. 12), proponen un modelo de destilación por oscilación de presión asistida por arrastre (EAPSD), que es un tipo de destilación PSD especial que muestra un rendimiento prometedor en la separación de azeótropos que son insensibles a la presión.

Sin embargo, existen estudios que demuestran que la ED frente a otras alternativas resulta ser menos económico en términos de energía. Wang et al., (2016, p. 185), abordan una comparación entre la destilación por oscilación de presión y una columna de pared divisoria extractiva (EDWC) para sistemas de acetonitrilo y n-propanol, en donde el TAC de la oscilación de presión integrada por calor disminuye en un 22,6 % en comparación con el de la columna de pared divisoria extractiva. Loy, Lee y Rangaiah (2015, p. 142) proponen una columna de pared divisoria extractiva EDWC como una alternativa para recuperación y purificación de bioetanol, realizan una evaluación económica para ambos procesos una vez que se integra y se optimiza el calor. Los resultados muestran que el proceso de EDWC presenta ventajas con respecto al proceso de PSA en términos de costo y demanda energética, el proceso PSA presenta un costo de 33% menos frente a EDWC debido a la pérdida del solvente, concluyendo que no se debe considerar únicamente el requerimiento de energía cuando se evalúa la viabilidad de una tecnología prometedora, más bien se debe realizar una evaluación general empleando condiciones realistas. Qi et al., (2020, p. 11), por su parte, proponen tres alternativas de separación para mezclas de acetonitrilo/agua: proceso de ED, PSD y una estrategia nueva de destilación (EAD), dicha evaluación de las tres alternativas de separación desde el punto de vista económico y ambiental indican que la estrategia nueva azeotrópica EAD de calor integrado resulta más atractivo debido a que su TAC disminuye en un 56,63% y las emisiones de CO₂ disminuyen en un 56,63% a comparación ED y PSD, además EAD proporciona una alternativa energéticamente eficiente para otros sistemas que forman azeótropos con agua.

Wang et al., (2020, p. 12), proponen el proceso de ED con solvente de alto punto de ebullición como agente de arrastre usado para separar azeótropos en productos industriales con el objetivo de emplear recursos y proteger el medio ambiente. Este proceso separa un sistema azeotrópico binario de n-heptano y alcohol isoamílico en aguas residuales por medio de ED, PSD y PSD con integración térmica. Obteniendo que la destilación por oscilación de presión con integración térmica puede ahorrar costos de hasta un 29,38% y aumentar la eficiencia termodinámica de hasta un 45,39%, reducir el potencial de calentamiento global de un 39,34% y disminuir la acidificación de hasta un 39,34%.

La optimización y el diseño de diferentes ED ha sido estudiando por múltiples autores, una alternativa prometedora es la destilación extractiva con líquidos iónicos. Hu et al., (2019, p. 736) y Ayuso et al., (2021, p. 10), presentan un enfoque que incluye disolventes orgánicos y líquidos iónicos como agentes de arrastre. Li et al., (2021, p. 337) , insertan el uso de líquidos iónicos en un sistema azeotrópico binario acetato de etilo y etanol, empleando arrastre de 1-octil-3-metilimi, para mejorar el rendimiento en destilaciones extractivas, donde los líquidos iónicos tienen un efecto destacado en la interacción entre moléculas de solvente. An et al., (2015, p. 116-178), muestra la posibilidad de ahorro energético de un sistema de ED de tres columnas. Li, Yudong et al., (2021,

p. 10) demostraron que una columna de pared divisoria extractiva con calor integrado posee mayor potencial de ahorro de energía. Shen et al., (2021, p. 1), proponen un estudio de optimización y diseño de destilación extractiva de pared divisoria para la síntesis de carbonato de dimetilo, dicho proceso de separación reduce aproximadamente 21% de las emisiones de CO₂ en un 10%, siendo ventajosamente económico y con alto desempeño ambiental.

Además, estudios demuestran el potencial de la destilación extractiva para separación de mezclas multi azeotrópicas, Liu et al., (2022, p. 1) proponen un diseño comparativo y control efectivo de la destilación extractiva a diferente presión para la separación de un sistema conformado por acetona-metanol, en donde el TAC y emisiones de CO₂ se reducen en un 22,17% y un 48,17% respectivamente, además proponen un proceso de ED alternativo con precalentamiento de alimentación dando como resultado una reducción del 24,08% en el TAC y una reducción del 48,33% en emisiones de CO₂ en comparación con el proceso de ED convencional. Wang, Chao et al., (2020, p. 27) realizaron el estudio de secuencias de ED convencional y de corriente secundaria para la separación del azeótropo binario metanol-tolueno, los resultados muestran que dos secuencias DC-SSED (Destilación extractiva de corriente lateral de doble columna) demuestra superioridad en ecoeficiencia a comparación con el proceso de CED óptimo, dicho estudio busca optimizar siete secuencias de ED para minimizar el TAC.

Yang, Shi, et al., (2019, p. 50), investigaron las ventajas en eficiencia energética que supone la destilación extractiva ternaria de doble flujo lateral (DSTED), en donde se propone un esquema DSTED de ahorro de energía para separar mezclas azeotrópicas ternarias de acetonitrilo/metano/benceno. Zhang, Wu y Chien (2021, p. 10), desarrollan una configuración de proceso de destilación reactiva-extractiva de triple columna (TCRED) para sistemas ternarios con el fin de reducir el costo de capital y consumo energético, donde se sugiere que la aplicación de más esquemas de ahorro de energía en sistemas, el TAC y costo operativo total pueden ahorrarse considerablemente.

Wang et al., (2019, p. 221), hace mención acerca de la sostenibilidad de la ED ternaria para tratamiento de aguas residuales mediante la optimización del diseño y efectos de la presión de operación en la separación de mezcla de acetonitrilo/metanol/ agua por ED ternaria, El proceso de ED ternaria con presión de operación optima muestra un ahorro de costos energéticos del 60,1% y un ahorro de TAC del 47% a comparación del proceso que opera a presión atmosférica.

No obstante, la destilación extractiva sigue siendo un proceso intensivo que consume grandes cantidades de energía para regenerar el agente de arrastre. Gu et al., (2018, p. 310), proponen determinar la presión de operación de la columna extractiva en un proceso extractivo homogéneo ED para la separación de un azeótropo mínimo binario con arrastre pesado, diseñaron seis procesos bajo diferentes presiones y compararon su economía, aplicando por primera vez procesos de integración de calor de doble efecto bajo presión atmosférica reducida para mejorar

la eficiencia energética, con la finalidad de investigar el efecto de la presión sobre el proceso propuesto, mostrando que el TAC del mejor diseño propuesto muestra una reducción del 20,3% respecto a la presión atmosférica.

Por otra parte, la bomba de calor tiene un buen potencial para mejorar la eficiencia térmica de los procesos de destilación. Zhu et al., (2021, p. 448), comprobaron que la bomba de calor combinada con el proceso de destilación extractiva de acoplamiento térmico muestra mejor desempeño ambiental y termo-económico mediante la investigación de ahorro de energía en la recuperación de material orgánico de aguas residuales por ED de acoplamiento térmico combinada con bomba de calor para mezclas azeotrópicas de ciclohexano/alcohol sec-butílico/agua. Wang et al., (2021, p. 7), estudiaron secuencias de ED asistida por bomba de calor con arrastrador de punto intermedio, para separar azeótropo de acetona/ n-heptano, los resultados ilustran que la secuencia de destilación extractiva convencional indirecta (ICED) supera la secuencia directa DCED, mientras que secuencias asistidas por recompresión de vapor VRHP-CED muestran ventajas a comparación de las secuencia ICED en términos económicos, energéticos y ambientales, las secuencias VRHP-DCED muestran que con el mínimo consumo de vapor pueden provocar una disminución del 83,38% . Kiss, Luo y Bildea. (2015, p. 1312), propusieron un proceso de ED asistida por bomba de calor que tiene lugar en la columna de pared divisoria (DWC) para la purificación del bioetanol, demostrando que los requisitos energéticos se reducen de 2,07 kWh/kg a 1,24 kWh/kg, permitiendo el ahorro de energía de más del 40% y reducción del 24% en costos anuales a comparación del proceso convencional.

Xu et al., (2021, p. 13), estudiaron el método de destilación extractiva tanto directa (DED) como indirecta (IDE) para la separación de la mezcla ternaria de isopropanol/ tetrahidrofurano/agua empleando como solvente dimetilsulfóxido, además, se introduce una bomba de calor de vapor, para recomprimirlo e integrar calor para mayor ahorro de energía (DED-DP), en donde la destilación extractiva directa asistida por bomba de calor doble tiende a ser mejor ya que muestra mejor desempeño en conservación de energía del 64,97% y disminución de costos de 34,26 % en comparación a la destilación extractiva directa.

Por el contrario, Shi et al., (2020, p. 258), concluyeron que la ED indirecta asistida por bomba de calor es el proceso más eficiente energéticamente ya que ahorra un 14,78% en consumo de energía a comparación de ED directo. Patraşcu, Bildea y Kiss. (2017, p. 72), propusieron un modelo nuevo de ED asistida por bomba de calor en una columna de pared divisoria para la deshidratación de bioetanol, el cual permite un ahorro de energía superior al 40%, donde dichos beneficios económicos solo son posibles si el sistema altamente integrado también es controlable para garantizar la disponibilidad operativa.

2.1.2. Simulación de procesos de destilación para sistema de n-hexano y acetato de etilo

Chen et al., (2022, p. 10), determinaron que DMF proporciona mejor rendimiento dinámico cuando es introducido como agente de arrastre en la destilación extractiva convencional (CED) un sistema azeotrópico n-hexano-acetato de etilo, el uso de DMF era más económico en relación con el empleo de NMP, pero no se compara el desempeño ambiental y dinámico de ambos procesos, el desempeño ambiental en base a la emisión de CO₂ revela que el uso de DMF es más sostenible en comparación de NMP y proporciona un rendimiento dinámico en aproximadamente 3 veces. Yang y Ward. (2017, p. 126), realizaron un proceso de destilación por cambio de presión (PSD) para separar n-hexano y acetato de etilo, este proceso de cambio de presión resulta ser beneficioso debido a que no se introduce componentes adicionales conocidos como arrastres al sistema, sin embargo, el estudio supuso un costo total anual (TAC) de 2,14 millones de dólares en comparación de los 0,92 -1,76 millones para otros procesos de separación basados en arrastre por lo que resulta ser más costoso.

Lü et al., (2018, p. 124), establecieron una comparación entre métodos de destilación para la mezcla azeotrópica n-hexano y acetato de etilo, por un lado, se compara la destilación por cambio de presión (PSD) optimizado frente a procesos de destilación azeotrópica homogénea continua (CHAD) empleando acetona como agente de arrastre y destilación por oscilación de presión integrada (HIPSD), en donde el HIPSD parcial es mejor para mezclas de acetato de etilo y n-hexano ya que los costos de energía y el TAC del proceso tiene reducciones de 62.61 % y 49.26% en comparación con el proceso CHAD y de 40,79 % y 35,94% con respecto al PSD convencional, esta reducción se debe a que el rehervidor de la columna de baja presión (LPC) consume energía por el vapor de cabeza de la columna de alta presión (HPC) en lugar de vapor de baja presión y el proceso ahorra el condensador del HPC, además este proceso supone más ventajas para evitar la contaminación del producto, ahorro de energía y en la economía.

Li et al., (2022, p. 10), proponen una destilación azeotrópica heterogénea (HAD) para un sistema ternario de acetonitrilo/acetato de etilo/ n-hexano, para minimizar el consumo de energía agregan una bomba de calor sobre la base de una destilación azeotrópica heterogénea óptima, empleando una tecnología de integración de calor para mejorar la recuperación de energía, y el proceso que emplea la bomba de calor con mayor temperatura de precalentamiento (HPT) asistida por el proceso HAD mediante combinación con integración de calor tiene mejores rendimientos económicos, medioambientales, energéticos y exergéticos a comparación de procesos HAD convencionales, reduciendo el 52,17%, 68,86%, 65,87% y 64,46% en TAC, en consumo de energía, emisión de gases y destrucción de exergía respectivamente.

2.2. Referencias teóricas

2.2.1. Componentes

2.2.1.1. Acetato de etilo (AcEt)

El acetato de etilo es un compuesto orgánico empleado en diferentes industrias y en diversas aplicaciones, es incoloro y presenta características agradables de fragancia que junto con su bajo costo y nivel de toxicidad lo convierten en diluyente y solvente de pinturas, industria de perfumes, alimentos y bebidas, o en industria de cuero (Adesina et al. 2021, p. 3). Además, es utilizado en recubrimiento de superficies, tintas, resinas sintéticas, agentes adhesivos, en manufactura de películas, seda artificial, placas fotográficas, perfumes, piel artificial, etc., (Ramírez et al. 2022, p. 4048). El acetato de etilo encuentra uso como potenciador del sabor en alimentos y productos farmacéuticos debido a su sabor afrutado cuando se diluye, también está aprobado para usarlo como aditivo alimentario en determinados materiales de envasado (Marino 2005, p. 277). La síntesis de los acetatos se lo realizan por vía química a través de esterificación de Fischer entre el ácido acético y el etanol, las ventas a partir del 2019 de acetato de etilo superan los 4 mil millones de dólares por año (Serna et al. 2015, p. 23).

2.2.1.2. *N*-hexano

El *n*-hexano es un hidrocarburo alifático neutro de cadena lineal, es un destilado de petróleo volátil e incoloro, insoluble en agua y se encuentra presente como un componente menor en la gasolina, tiende a migrar a la atmosfera después de una liberación ambiental, no representa un peligro para la cadena alimentaria. La exposición humana se da por contacto dérmico o inhalación, históricamente el hexano se usaba como solvente universal hasta que se descubrió que la exposición crónica causa polineuropatía distal tardía (Clough 2014, p. 900).

El hexano comercial es una mezcla de varios tipos de isómeros de hexano con cantidades menores de heptano, pentano, ciclohexano y ciclopentano. Es usado para determinar el índice de refracción de minerales, para calibraciones, como pintura diluyente y en termómetros, es utilizado en la extracción de aceite de soja, de semilla de algodón, de linaza, de semilla de cártamo y otras semillas oleaginosas, a veces es utilizado como desnaturizante de alcohol y como agente de limpieza en industrias textiles, de mueble y cuero, aunque está siendo reemplazado por disolventes menos tóxicos, además es un reactivo de laboratorio común y un componente de varios productos relacionados con las industrias del petróleo y la gasolina (Clough y Mulholland 2005, p. 522).

2.2.2. Compuestos azeotrópicos

Las mezclas azeotrópicas son sistemas de disolventes multicomponente, tienen un valor importante a nivel industrial y son difíciles de estudiar desde el punto de vista científico. Un azeótropo ebulle a una temperatura constante, y sus compuestos químicos no pueden separarse a través una destilación simple, un azeótropo se genera cuando la composición de un vapor en equilibrio con una mezcla líquida tiene la misma composición como el líquido (Lee y Wytcherley 2000, p. 991). Por lo general, las mezclas azeotrópicas binarias están formadas por dos compuestos en estado líquido, los cuales ocurren con mayor frecuencia; por lo general los componentes están presentes en fase líquida y a la vez son muy polares, ya que tiene una pronunciada capacidad para formar puentes de hidrógeno (Mandagarán y Campanella 2008, p. 74).

2.2.3. Destilación

La destilación es uno de los métodos de separación y purificación más antiguos y empleados en conjunto con la cristalización y probablemente uno de los más comprendidos e investigados. La destilación emplea un principio de separación muy simple, el cual consiste en el contacto íntimo entre la mezcla inicial y una segunda fase para mejorar la transferencia de masa entre las dos fases (Otiniano 2004, p. 220). La destilación es una unidad de separación bien definida la cual consiste en la evaporación parcial de una mezcla líquida y sucesivas condensaciones con una composición que difiere de la evaporación (Fellows 2022, p. 400).

2.2.3.1. Destilación extractiva

La destilación extractiva se aplica con más frecuencia en la industria, la característica destacada de la destilación extractiva es que se agrega un nuevo solvente o agente de separación con un alto punto de ebullición a los componentes que se van a separar para aumentar su volatilidad relativa, por lo que, la selección de un solvente adecuado es muy importante para asegurar un diseño efectivo y económico. El diseño asistido por computadora es una herramienta útil para seleccionar los solventes y, por tanto, reducir el trabajo experimental (Lei, Dai y Chen 2022, p. 73).

La destilación extractiva es usada para separar mezclas con puntos de ebullición cercanos o azeótropos, en la destilación extractiva se debe agregar un solvente a la columna de destilación, este solvente se selecciona para que uno de los componentes, pase a él en forma selectiva (Ramírez et al. 2022, p. 15). La destilación extractiva se lleva a cabo por medio de una columna de destilación extractiva y otra de recuperación del disolvente, un componente se retira de la parte superior de la columna de extracción y el otro compuesto junto con el disolvente se eliminan como residuos,

el residuo entra a la columna de recuperación en donde el disolvente se puede recuperar y se recicla hacia la primera columna (Gerbaud et al. 2019, p. 5). En la Ilustración 1-2, se muestra el esquema tecnológico del proceso de destilación extractiva:

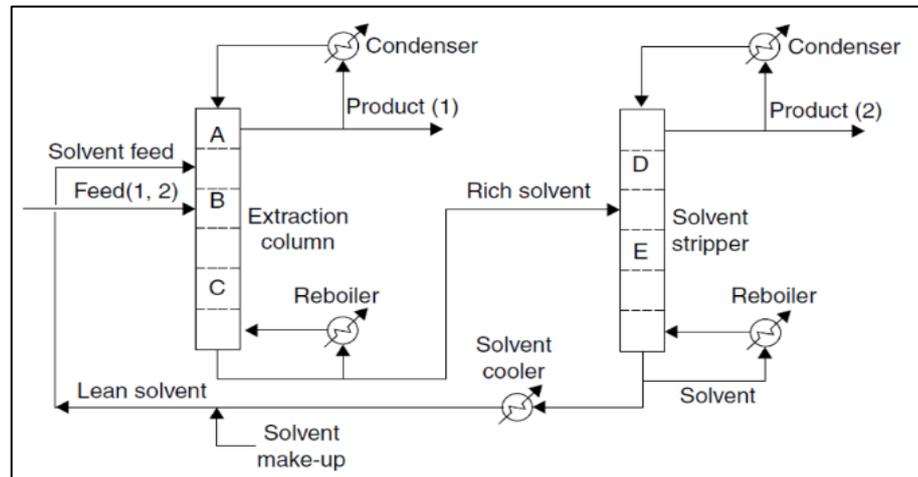


Ilustración 1-2: Proceso de destilación extractiva

Fuente: Ramírez et al., 2022, p.2.

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

El proceso consiste en dos columnas, la primera para el proceso de separación extractiva y la segunda empleada para recuperación del solvente, las mezclas azeotrópicas y el solvente se alimentan a la primera columna de destilación, dichos componentes hierven separados permitiendo que compuestos menos volátiles se acumulen en el fondo y en la parte superior de la columna se acumula el compuesto más volátil. El producto del fondo alimenta a la segunda torre en donde se recupera el disolvente y se recircula a la primera torre de destilación extractiva. Además, el disolvente debe tener características especiales para lograr la separación esperada, por lo que debe poseer estabilidad térmica, puntos de ebullición más altos, baja toxicidad, cambio de volatilidad relativa entre componentes, y de fácil recuperación (Gil et al. 2009, p. 3).

2.2.4. *Simulador de procesos químicos*

2.2.4.1. *ASPEN PLUS*

Es un software que permite simular procesos químicos de manera simple, puede abordar diferentes procesos químicos que parte desde el modelamiento, optimización, simulación, especificaciones de diseño, análisis de sensibilidad, ahorro de energía, dinámica y control hasta el análisis económico del proceso. Las características innovadoras e interfaz intuitiva permiten realizar todo tipo de procesos químicos dentro de un solo ambiente. Presenta una gran base de

datos de propiedades de variedad de sustancias, así como de los modelos termodinámicos inclusive para mezclas, el programa tiene incorporado un optimizador, posee gran cantidad de módulos como Polymer, Zyquad, Water, Batch, etc., y posee resolución Equation Oriented (ED) dentro de sus métodos de cálculo (Vicente 2007, p. 18).

2.2.4.2. *CHEMCAD*

Es un simulador simple el cual presenta una gran base de datos de propiedades de varias sustancias al igual que los modelos termodinámicos y consta de suficientes operaciones para la simulación de procesos químicos, además, se emplea para calcular requerimientos de energía, comportamiento de equipos, dimensionamiento, etc. Los informes y gráficos se pueden exportar con gran facilidad a terceros (Vicente 2007, p. 16).

2.2.4.3. *DWSIM*

Es fundamental que un simulador de procesos cubra gran variedad de sistemas ya sea desde los más simples a los más complejos y elaborados como simulaciones de procesos en industrias químicas o petroleras, DWSIM es un simulador de procesos químicos de libre descarga, el cual posee la capacidad de modelar equilibrios de fase entre líquidos, vapor o fase sólida donde sea posible, el paquete CAPE-OPEN posee diferentes especificaciones para un alto rango de aplicaciones en simulación y capacidades de equilibrio, la ventaja del software es su compatibilidad con diversos sistemas operativos, además posee una interfaz gráfica de fácil manejo y permite emplear diversas operaciones unitarias, modelos termodinámicos complejos, soporte y herramientas (Medeiros 2016, p. 2).

2.2.4.4. *HYSYS*

Este es un simulador que junto con ASPEN PLUS constituyen dos de los mayores programas de simulación de procesos químicos, usado para modelar matemáticamente plantas químicas completas, refinerías, etc., posee al igual que los otros simuladores una enorme base de datos para propiedades de sustancias y modelos termodinámicos, cuenta con numerosos parámetros y operaciones unitarias, no tiene optimizador, suele ser usado en grandes compañías, especialmente en la industria del petróleo y es más económico a comparación de ASPEN PLUS (Vicente 2007, p. 17).

2.2.5. Red Neuronal Artificial

Las Redes Neuronales Artificiales están inspiradas en las redes neuronales biológicas del cerebro humano, estas son redes interconectadas masivamente en paralelo de elementos simples y con organización jerárquica. Según Matich (2001, p. 11), las RNA presentan diversas características parecidas a las del cerebro, son capaces de aprender de la experiencia o abstraer características esenciales, dentro de las ventajas que ofrece esta tecnología se encuentra; el aprendizaje adaptativo, que consiste en la realización de tareas en base a un entrenamiento recibido previamente, la auto organización, que es la capacidad para crear su representación individual en etapas de aprendizaje, la tolerancia a fallos en las cuales las capacidades de la RNA suelen retenerse pese a sufrir grandes daños, la operación en tiempo real, ya que son capaces de realizar cómputos neuronales en paralelo y la fácil inserción dentro de una tecnología existente, por ejemplo los Chips especializados los cuales mejoran su capacidad para la realización de tareas específicas.

2.2.5.1. Elementos básicos de una RNA

El elemento procesador (PE) es la unidad análoga de la neurona biológica, el cual posee varias entradas y las combina con una suma básica, la suma de entradas se modifica con una función de transferencia, y el valor de salida de esta función de transferencia se pasa a la salida del PE. La salida del PE se conecta a entradas de otras RNA por medio de conexiones ponderadas tal como la sinapsis de las conexiones neuronales (Viñuela y Galván 2004, p. 7). En la Ilustración 2-1 se muestra la representación básica de una RNA.

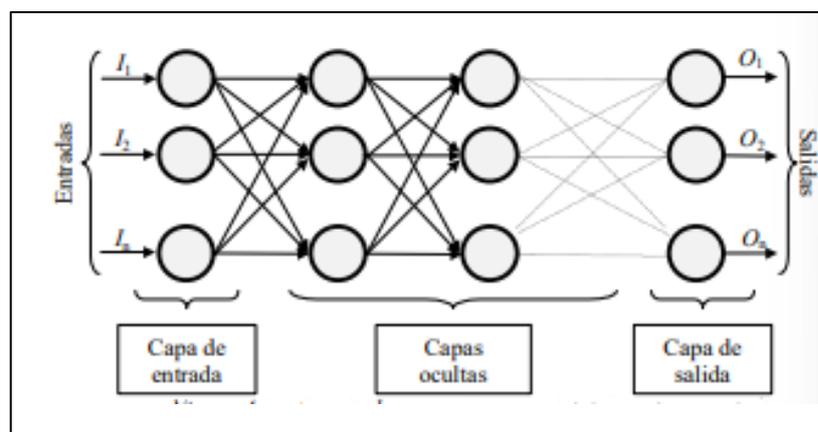


Ilustración 2-1: Esquema de una Red Neuronal conectada

Fuente: Matich, 2001, p.12.

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

La RNA está conformada por neuronas interconectadas y dispuestas en tres capas, la última capa puede llegar a variar de acuerdo a las necesidades, los datos ingresan por la capa de entrada, luego atraviesan la capa oculta que puede estar comprendida por diferentes capas y salen por la capa de salida (Matich 2001, p. 12).

2.2.6. Plataforma de programación

2.2.6.1. SCILAB

Es un software abierto y permite su descarga en cualquier plataforma ya sea Windows, Linux, etc., cuenta con un alto nivel de lenguaje de programación para cálculos matriciales, visualización gráfica y análisis numérico, cuenta con estructura de datos elaborados, lenguaje de programación similar a Matlab, Gráficos 2d, 3d y animación, además sus requisitos para software y hardware no son muy amplios, y el uso de toolboxes permite completar diversas aplicaciones que no están incluidas en el programa básico (Cortes y Ormaza 2006, p. 9).

2.2.6.2. MATLAB

Matlab diseñado para realizar cálculos numéricos, programación y visualización sencillo de emplear, ofrece un entorno de IDE (desarrollo integrado), proporciona una interfase con líneas de comando para resolver problemas tanto no lineales como lineales. Las capacidades se pueden ampliar con las cajas de herramientas (toolboxes) como por ejemplo toolboxes en optimización, estadística, análisis de datos diseño de sistemas de control redes neuronales artificiales, modelado y análisis financiero (Flores 2012, p. 64).

2.2.6.3. LABVIEW

Es una plataforma empelada para el diseño de programas que cuenta con un lenguaje de programación gráfico para sistemas de prueba, diseño y control ya sea real o simulado. Es excelente para la adquisición y procesamiento de señales, sin embargo, no existen programas que entrenen redes neuronales en LabVIEW debido a que no se aprovechan las características para adquisición de señales y no existe un seguimiento de técnicas de programación adecuadas para el entrenamiento en línea, pero se puede emplear la herramienta “Matlab script node” el cual ejecuta el software MATLAB en cual cuenta con toolbox especializados en redes neuronales artificiales (Martínez, Hernández y Gutiérrez 2013, p. 132).

CAPÍTULO III

3. MARCO METODOLÓGICO

3.1. Ingeniería del proyecto

En el presente trabajo de titulación “Desarrollo de una RNA para el control de la destilación extractiva asistida por recompresión de vapor para la separación de n-hexano y acetato de etilo” tiene la siguiente metodología propuesta presentada en la Ilustración 1-3.

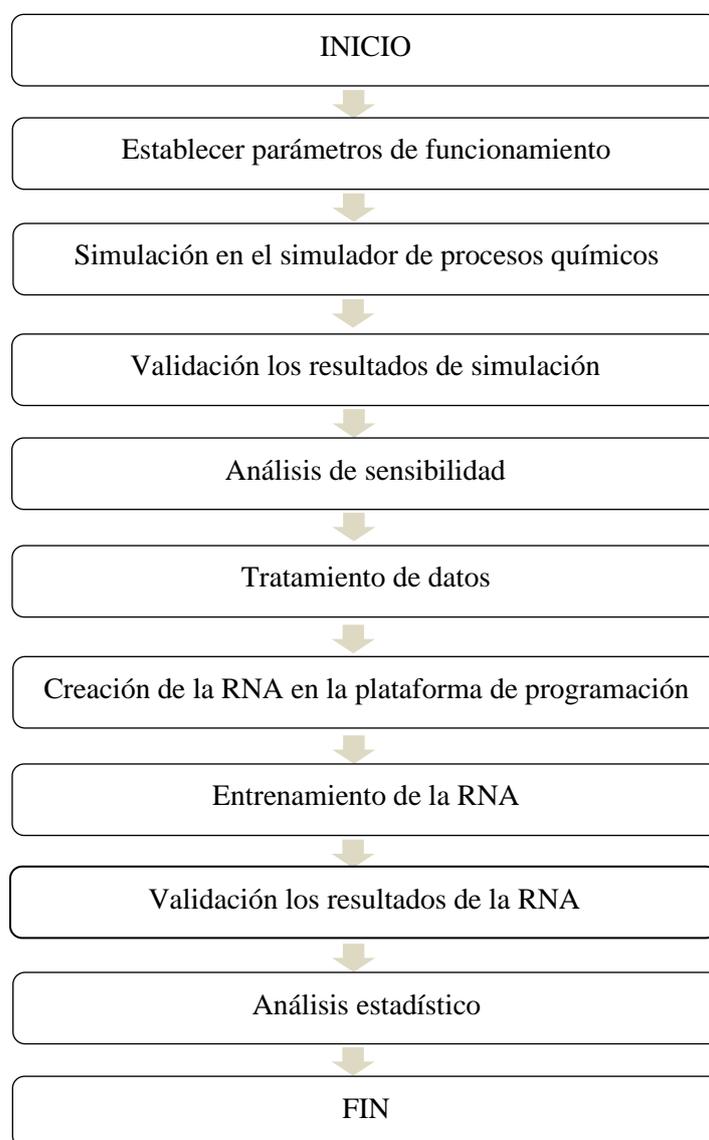


Ilustración 1-3: Metodología para el desarrollo de la RNA

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

3.1.1. Descripción del proceso

El diagrama de flujo del proceso VRHP-ED se muestra en la Ilustración 2-3, donde la corriente de vapor superior de la columna de destilación extractiva (EDC) es precalentada por el condensado del rehervidor de EDC y luego comprimida por el compresor. El vapor superior comprimido a mayor temperatura y presión se utiliza para suministrar la mayor parte del trabajo del rehervidor de EDC mediante la liberación del calor latente. El condensado resultante se usa primero para precalentar la corriente de vapor superior (antes de alimentar al compresor); luego, su presión se reduce a la presión de operación del tambor de reflujo EDC, se enfría usando agua de enfriamiento y finalmente fluye hacia el tambor de reflujo. En el proceso VRHP-ED, el número de etapas teóricas, las ubicaciones de alimentación y las condiciones operativas de las columnas se mantienen igual que aquellos en el proceso ED optimizado ya que la adición de VRHP no afecta el funcionamiento de la columna. La alimentación fresca se alimenta en la sección media de EDC después de precalentado por el arrastrador de reciclaje recuperado, mientras que el arrastrador de reciclaje enfriado (NMP) se alimenta a la sección superior de EDC después de mezclar las dos corrientes de make-up y NMP reciclado. Se obtiene n-hexano de alta pureza en la parte superior de EDC mientras que una mezcla de acetato de etilo y NMP se obtiene en la parte inferior de EDC, que luego se alimenta a ERC. Se obtiene el destilado de acetato de etilo de alta pureza mientras que NMP se obtiene en la parte inferior de ERC.

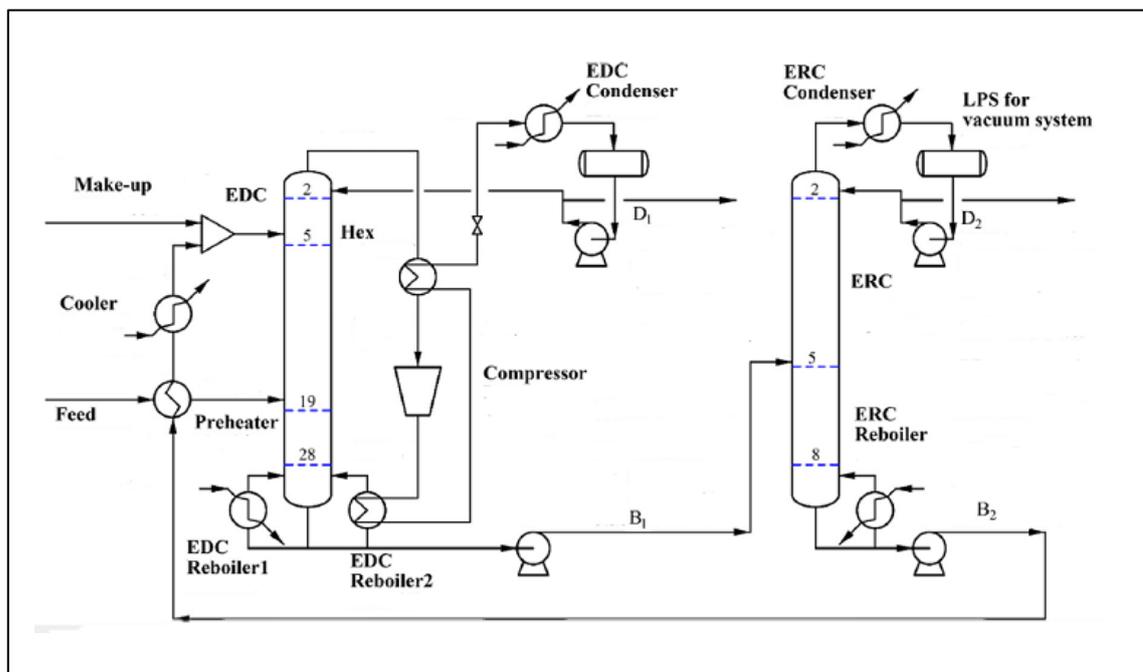


Ilustración 2-3: Diagrama de flujo de destilación extractiva asistida por recompresión de vapor

Fuente: Feng et al, 2020, p.10.

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

3.1.2. Parámetros de funcionamiento

Los parámetros de funcionamiento se tomaron del modelo propuesto en la revista “Separation and Purification Technology” titulado como “Design and control of vapor recompression assisted extractive distillation for separating n-hexane and ethyl acetate” propuesto por Zemin Feng, del departamento de Ingeniería Química y Biomolecular de la Universidad Nacional de Singapur; Shen Weifeng, de la Escuela de Química e Ingeniería Química de la Universidad de Chongqing en China; G. P. Rangaiah, del departamento de Ingeniería Química y Biomolecular de la Universidad Nacional de Singapur, y Lichun Dong, de la Escuela de Química e Ingeniería Química de la Universidad de Chongqing, China, publicado en el año 2020. Basándose en la información proporcionada por Feng et al., (2020), se establece parámetros de funcionamiento para 4 secciones; condiciones de operación de entrada, condiciones de operación de la columna destilación extractiva, condiciones de operación de recompresión de vapor, y las condiciones de operación de la columna de recuperación.

3.1.2.1. Condiciones operativas del proceso

La Tabla 1-3 resume la composición de la alimentación que ingresa a la columna EDC, se detallan datos de ingreso de la columna de alimentación (Feed) y de reposición (Make-up), donde se tomaron en consideración parámetros de presión, temperatura, flujo molar de las corrientes y composición de las fracciones molares de interés. Mientras que las Tablas 2-3; 3-3 detallan las condiciones de operación de las columnas extractiva y de recuperación respectivamente, finalmente en la tabla 4-3 se detalla las condiciones de operación del compresor empleado en la etapa de recompresión. En EDC, el producto destilado es N-hexano alta pureza (99,9 wt%), mientras que el producto de fondo es una mezcla de NMP (71,52 wt%) y Acetato de etilo (28.47 wt%) y en ERC el producto destilado de alta pureza es acetato de etilo con 99,9 wt% y se obtiene NMP de alta pureza (99,97 wt%) en el fondo.

Tabla 1-3: Condiciones de entrada

Entradas	Parámetros	Cantidad	Unidad
Alimentación (Feed)	Presión	1.2	Bar
	Temperatura	25	C
	Flujo molar de la corriente de Alimentación	100	Kmol/h
	Composición inicial de acetato de etilo (EA) (C ₄ H ₈ O ₂) *	0.39	-
	Composición inicial de n-hexano (HE) (C ₆ H ₁₄) *	0.61	-
	Composición inicial de NMP (C ₆ H ₇ NO) *	0.00	-
Reposición (Make- up)	Presión	1.2	Bar
	Temperatura	25	C
	Flujo molar de la corriente de reposición	0.00389	Kmol/h
	Composición inicial de acetato de etilo (EA) (C ₄ H ₈ O ₂) *	0.00	-
	Composición inicial de n-hexano (HE) (C ₆ H ₁₄) *	0.00	-
	Composición inicial de NMP (C ₆ H ₇ NO) *	1.00	-

Nota: * Composiciones en fracción molar

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

El caudal de la alimentación fresca (61 % en peso de n-hexano y 39 % en peso acetato de etilo) se establece en 100 kmol/h (= 8691,94 kg/h), y la pureza deseada del producto de AcEt y n-hexano se establece en 99,9% en peso. La temperatura de la corriente de alimentación se establece en 25 °C, la temperatura de alimentación después de precalentado por el arrastrador de reciclaje desde el fondo de ERC se fija a 64 °C, que es la temperatura de saturación de la alimentación fresca a 1 atm. La presión de operación de EDC es fijado a 1 atm en la práctica industrial para flexibilidad de operación y seguridad. El enfoque de temperatura mínima de todos los intercambiadores de calor. (incluidos los rehervidores y condensadores) se elige como 10 °C para una adecuada fuerza impulsora de la temperatura para la transferencia de calor.

Tabla 2-3: Condiciones de funcionamiento de la columna extractiva EDC.

Parámetros	Cantidad	Unidad
Presión	1	Atm
# etapas de la columna*	29	-
# etapa de flujo de alimentación*	19	-
# etapa del flujo de reposición*	5	-
Relación de reflujo (RR1)	0.79	-
Flujo molar de alimentación	100	Kmol/h
Flujo molar de corriente reposición	0.00389	Kmol/h
Calor del condensador	224.5	kW
Calor del rehervidor 1	138.68	kW
Calor del rehervidor 2	856.75	kW
Enfriador	76.80	kW
Precalentador	218.30	kW

Nota: *numerado desde la parte superior de la torre extractiva de forma ascendente

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

Tabla 3-3: Condiciones de funcionamiento de la columna recuperación ER.

Parámetros	Cantidad	Unidad
Presión	1	Atm
# etapas de la columna*	9	-
# etapa de corriente B1*	5	-
Relación de reflujo (RR2)	0.26	-
Flujo molar B1	124.32	Kmol/h
Calor del condensador	468.84	kW
Calor del rehervidor	607.88	kW

Nota: *numerado desde la parte superior de la torre extractiva de forma ascendente

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

Tabla 4-3: Condiciones de funcionamiento del compresor.

Parámetros	Cantidad	Unidad
Presión entrada	1.02	Bar
Presión salida	4.84	Bar
Eficiencia del compresor	0,8	%
Eficiencia del motor	0,9	%

Fuente: Feng et al. 2020, p. 9.

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

3.1.3. Simulación en el simulador de procesos químicos

Para simular el proceso de destilación extractiva asistida por recompresión de vapor se escoge un simulador de procesos químicos que se adecue a las necesidades, por lo que, se emplea el simulador DWSIM debido a que destaca por poseer ciertas características que lo posicionan a la par de otro simuladores comerciales como Hysys, Aspen Plus o Chemcad, dentro de estas características se destaca su gratuidad de los principales modelos termodinámicos integrados, además posee una interfaz gráfica de fácil entendimiento, y a su vez una amplia lista de operaciones unitarias, paquetes termodinámicos, sustancias, herramientas que permiten la caracterización de sustancias como el crudo, también es capaz de simular sistemas dinámicos y en estado estacionario, viene equipado con complementos en Excel permitiendo realizar cálculos termodinámicos directamente (Medeiros 2016, p. 2). Caso contrario de CHEMCAD ya que no suele ser muy usado en industrias de gran relevancia por lo que suele usarse como medio de aprendizaje más no para la puesta en práctica, además es menos versátil que ASPEN o HYSYS y suele tener un costo aproximado de 6511.08 dólares , y finalmente ASPEN PLUS tiene un costo aproximado de 7595.94 dólares para una licencia de 5 años es uno de los simuladores con alto precio y es menos empleado en la industria del petróleo (Vicente 2007, p. 17).

3.1.3.1. Esquema metodológico de la simulación

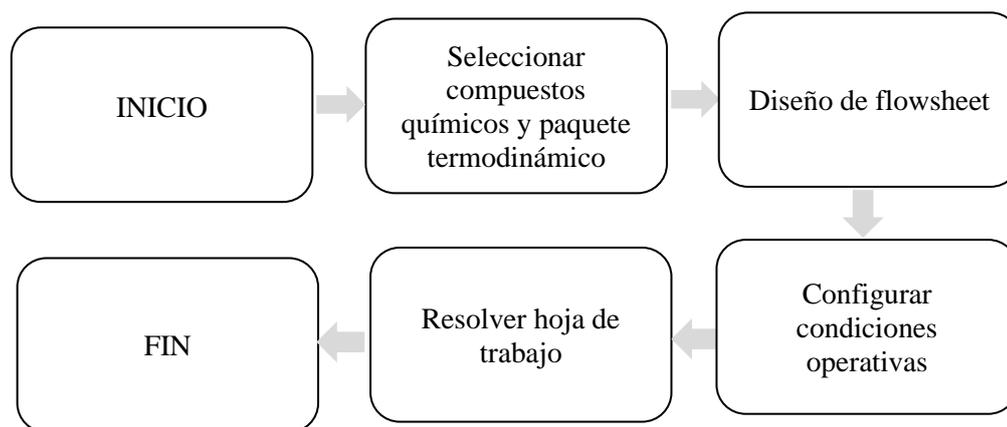


Ilustración 3-1: Esquema metodológico de la simulación del proceso de destilación extractiva asistida por recompresión de vapor.

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

3.1.3.2. Seleccionar compuestos químicos y paquete termodinámico

Los compuestos de interés n-hexano, acetato de etilo y NMP se encuentran incluidos en la amplia gama que ofrece DWSIM para la simulación de procesos químicos, por tanto, no es necesario crear estos componentes. Por otro lado, todas las corrientes de flujo y equipos operan con el paquete de propiedades termodinámicas Wilson. Para la selección del paquete termodinámico usado para un sistema binario N-hexano/acetato de etilo se tomó los paquetes termodinámicos sugeridos en el trabajo de Acosta et al. (2002, p. 2) en el cual demostró que los modelos NRTL, Wilson y UNIQUAC correlacionados son buenos para ajustarse a los datos experimentales en sistemas de n-hexano y acetato de etilo. De estos modelos, los resultados pronosticados por el modelo NRTL dan un error cuadrático medio (RMSE) relativamente menor para la temperatura y la fracción molar de n-hexano en fase de vapor que los modelos de Wilson y UNIQUAC cuando se simula empleando ASPEN PLUS, sin embargo, al ser empleado en DWSIM el paquete termodinámico sugerido no se adaptó al proceso operativo, por lo que, se tomaron las demás alternativas, siendo Wilson el más apto para la simulación en DWSIM en el proceso de destilación extractiva asistida por recompresión de vapor.

3.1.3.3. Diseño de flowsheet

El proceso creado en DWSIM está basado en la Ilustración 2-3, en primer lugar, se mezcla la corriente de reposición o make-up con la corriente Solvent2 que contiene NMP recuperado de alta pureza proveniente de la columna ERC, formándose una única corriente de NMP denominada

NMP 1 que ingresa al sistema, la corriente NMP que sale de la torre de recuperación pasa por un intercambiador de calor Pre-Heater para permitir el calentamiento de la alimentación, de esta manera el ingreso a la columna de destilación extractiva EDC son la corriente Feed Pre-heater y NMP1, una vez que ocurre el proceso de ED se obtienen dos corrientes D1 y B1, la corriente D1 como producto destilado, pasa por un intercambiador de calor HX-2 que permite su calentamiento antes de su ingreso al compresor C-1, una vez que el fluido es comprimido pasa a un enfriador CL-4 y es reciclado por el bloque lógico de reciclaje R-2 para ceder su calor a la corriente D1 al ingresar nuevamente al intercambiador HX-2, seguido ingresa la corriente 17 a una válvula de expansión VALVE-1 para reducir su presión de operación y finalmente ingresa la corriente 18 a un enfriador CL-3 y se obtiene la corriente N-HEXANO (producto deseado). En cambio, el producto de fondo B1 ingresa a un nuevo proceso de destilación para la obtención de ACETATO DE ETILO y recuperación de disolvente NMP de alta pureza, este último pasa por otro operador lógico de reciclaje para continuar con el ciclo. En la ilustración 4-3, se muestra el diseño del proceso de destilación extractiva asistida por recompresión de vapor descrita anteriormente.

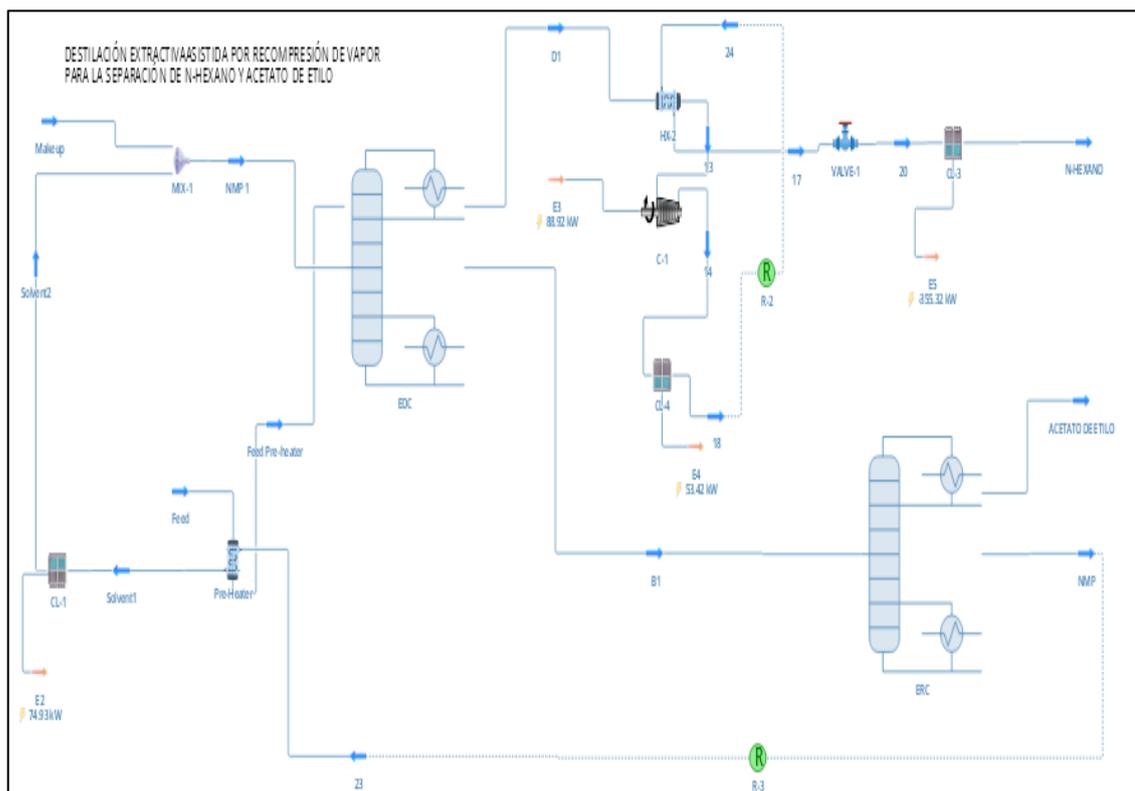


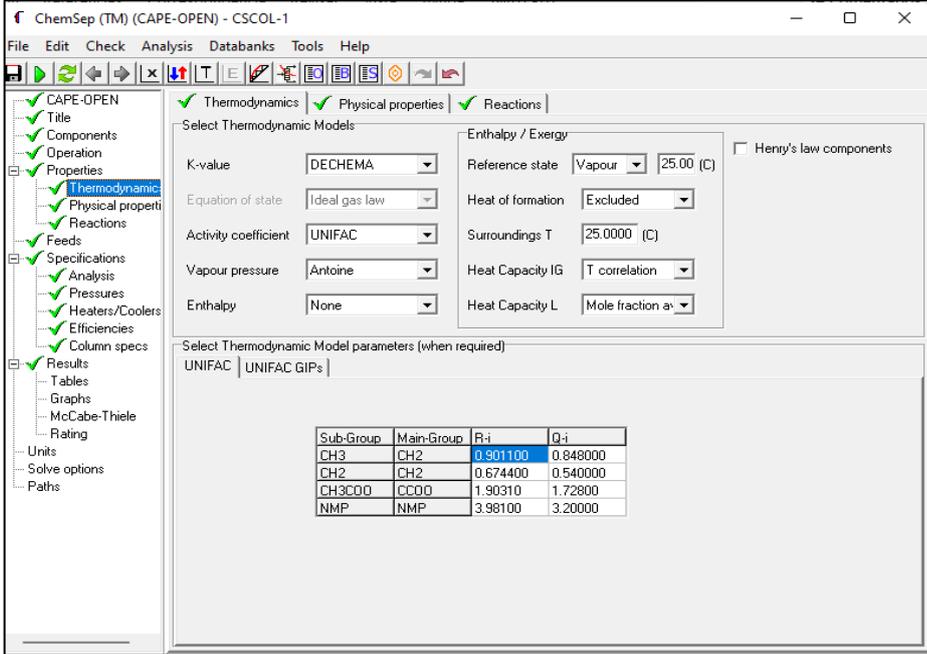
Ilustración 4-3: Simulación del proceso de destilación extractiva asistida por recompresión de vapor para la separación de n-hexano y acetato de etilo.

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

3.1.3.4. Configurar condiciones operativas

Las torres de destilación utilizadas para la simulación en la Ilustración 5-3 corresponden al modelo "ChemSep Column" se adaptan las dos torres de destilación extractiva a los modelos termodinámicos DECHEMA/UNIFAC/Antoine para modelar el equilibrio vapor-liquido del sistema binario n-hexano/acetato de etilo empleando valores obtenidos de Feng et al., (2020), los cuales se adaptan a DWSIM.

Una vez definidos los parámetros y disposición de entradas al sistema de destilación extractiva asistida por recompresión, se establece una columna de equilibrio con una destilación de tipo extractiva, en donde se lleva a cabo una condensación total y un reflujo parcial del producto destilado, ambos en estado líquido, con un número total de 29 platos en su estructura, con dos alimentaciones; una en el plato 5 y otra en el plato 19, los productos que se obtiene en la columna se extrae del plato 2 y del plato 29, este último sirven de alimentación a la segunda torre de recuperación, la primera salida en el plato 2 es la del n-hexano con un flujo molar de 61,56 kmol/h y la segunda del plato 29 que alimentara la ERC con un flujo molar de 124,32 kmol/h.



Sub-Group	Main-Group	R-i	Q-i
CH3	CH2	0.901100	0.848000
CH2	CH2	0.674400	0.540000
CH3COO	CCOO	1.90310	1.72800
NMP	NMP	3.98100	3.20000

Ilustración 5-3: Propiedades termodinámicas de la torre EDC

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

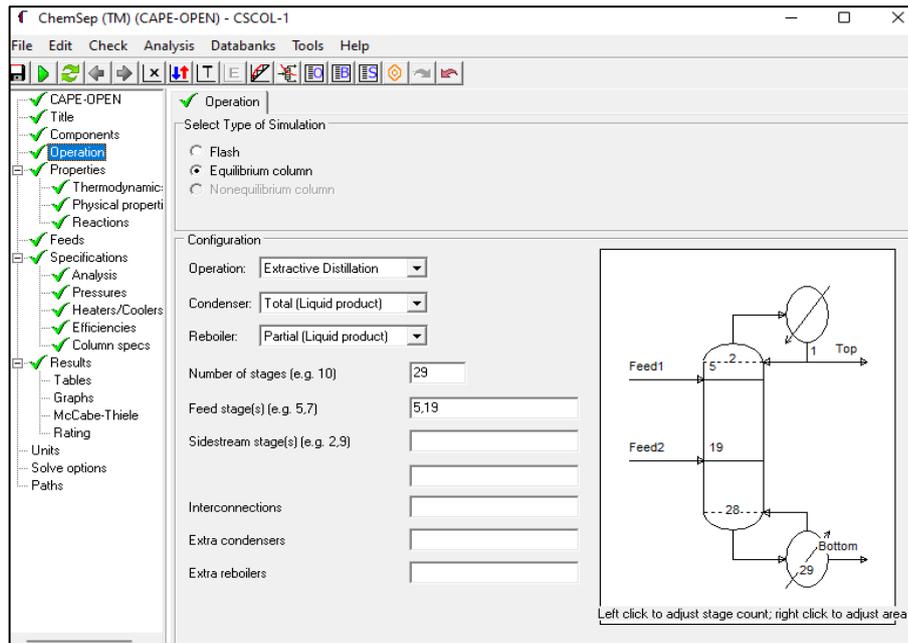


Ilustración 6-3: Operación de la columna de destilación extractiva

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

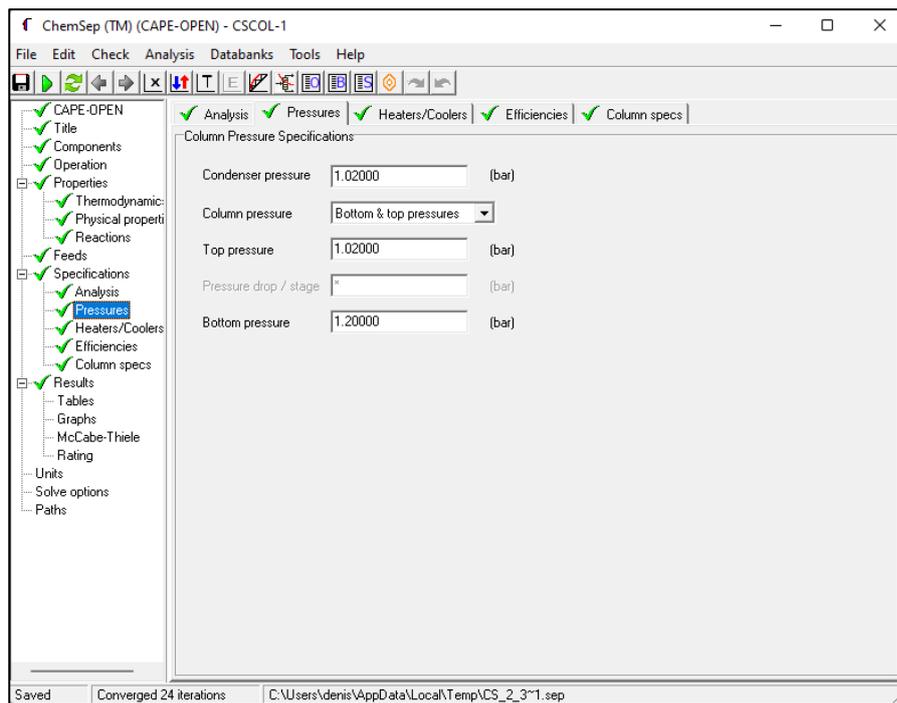


Ilustración 7-3: Condiciones de operación de presiones en EDC.

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

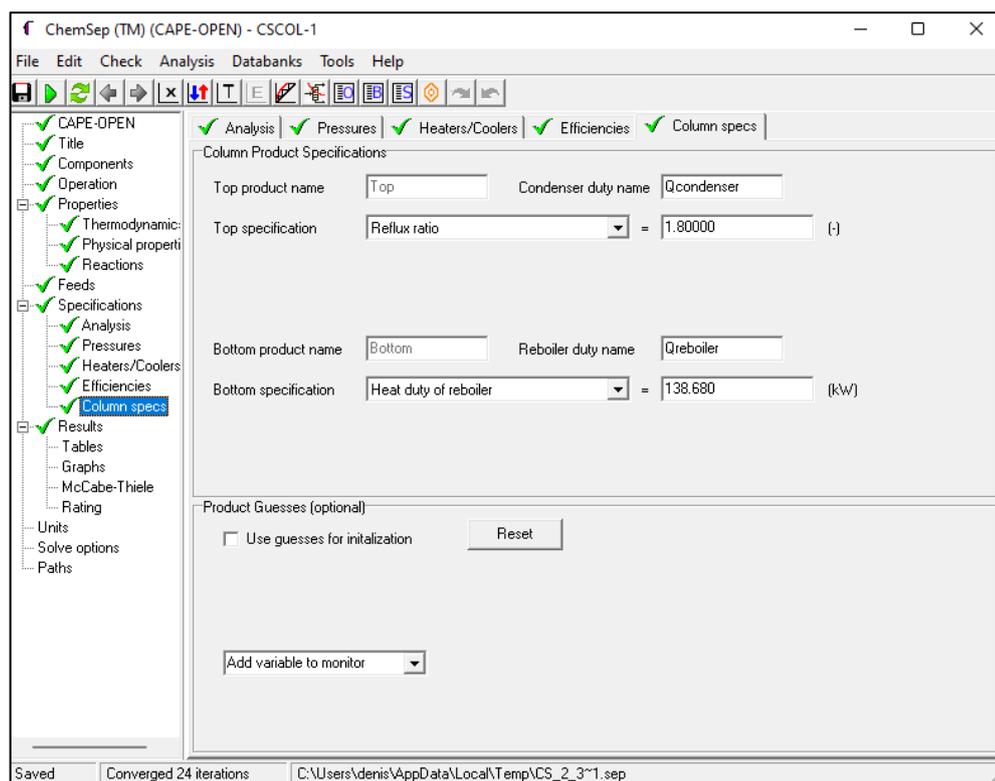


Ilustración 8-3: Especificaciones de funcionamiento en EDC.

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

3.1.4. *Análisis de sensibilidad*

Mediante una herramienta integrada en DWSIM “Sensitivity Study” se realiza el análisis de sensibilidad para conocer como las variables del proceso afectan la concentración de los componentes de salida del proceso, de tal forma que facilite la identificación de entradas a la red neuronal, la cual se creará de acuerdo a las variables críticas que afecten de manera significativa a la obtención de los componentes de interés. Para ello, se debe establecer las variables de entrada que posiblemente afecten el proceso, un rango para cada variable ya que deben cumplir con la lógica que rige el proceso en la vida real, número de repeticiones, y las salidas que varían frente a las modificaciones de entrada.

Cuando se realiza el análisis de sensibilidad se suelen aplicar varios métodos de acuerdo a las necesidades aprovechando funciones propias de DWSIM cuando los datos a ingresar sean de forma manual para cada variable que se desee estudiar, o sino empleando herramientas integradas. En la tabla 5-3 se muestran los parámetros que se usan para el análisis de sensibilidad del proceso.

Tabla 5-3: Factores para el análisis de sensibilidad

N° de Análisis	Variables de entrada	Unidades	N° de repeticiones	Rango de variación	Variables de salida	Unidades
1	Ratio de Reflujo (Torre EDC)	-	10	0.5-2	X_{HE}, X_{NMP1} , (Fracción Molar)	-
2	Temperatura del flujo de alimentación	°C	10	20-150	X_{HE}, X_{NMP1} , (Fracción Molar)	-
3	Flujo másico de alimentación	Kg/h	10	3-100	X_{HE}, X_{NMP1} , (Fracción Molar)	-
4	Flujo másico de reposición	Kg/h	10	8000-10000	X_{HE}, X_{NMP1} , (Fracción Molar)	-
5	Temperatura flujo entrada a ERC	°C	10	100-120	X_{AE}, X_{NMP2} , (Fracción Molar)	-
6	Ratio de Reflujo (Torre ERC)	-	10	0.8-2	X_{AE}, X_{NMP2} , (Fracción Molar)	-
7	Flujo másico del corriente ingreso a ERC	Kg/h	10	10000-20000	X_{AE}, X_{NMP2} , (Fracción Molar)	-

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

3.1.5. Tratamiento de datos

Al finalizar la simulación y validación por referente bibliográficos, se seleccionan entradas y salidas que serán empleadas para el diseño y entrenamiento de la RNA, para lo cual se debe generar una base de datos que cuente con 300 repeticiones con diferentes valores en las variables de operación o entrada, en donde se obtendrá valores de respuesta o salida según corresponda, en la tabla 6-3 se presentan las variables con mayor incidencia en la obtención de las fracciones molares de salida de las columnas de destilación del proceso y en la tabla 7-3 se muestran las variables que son afectadas por las entradas. Se delimitan 300 datos para la creación de la base de datos (Anexo A), de los cuales 250 son empleados para el entrenamiento de la RNA, y los 50 últimos se emplean para la validación externa para corroborar el funcionamiento de la red.

Tabla 6-3: Variables seleccionadas de entrada a la RNA

ENTRADAS			
Parámetros	Rango	Unidades	Identificación
Temperatura de entrada del flujo de Alimentación	20-150	°C	T1-F
Ratio de reflujo torre de recuperación de solvente	0.8-2	-	RR-ERC
Flujo másico corriente de Alimentación “feed”	8000-10000	Kg/h	FM1-F
Flujo másico corriente de reposición “make-up”	3-100	Kg/h	FM2-MU

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

Tabla 7-3: Variables de salida entrenadas por RNA

SALIDAS			
Flujos Molares	Unidades	Identificación	Ubicación
N-hexano	-	X_HE	Destilado de torre EDC
N-metil-2-pirrolidona	-	X_NMP1	Producto de fondo de torre EDC
Acetato de Etilo	-	X_AE	Destilado de torre ERC
N-metil-2-pirrolidona	-	X_NMP2	Producto de fondo de torre ERC

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

3.1.6. Creación de la ARN en la plataforma de programación

Para la creación de la ARN se elige una plataforma de programación más adecuada, se usa el MATLAB, ya que destaca por tener ciertas características a comparación de otras plataformas de programación como SCILAB o LABVIEW, Matlab es la plataforma de programación más empleada para el análisis de datos, desarrollo de algoritmos, creación de modelos, además, ofrece toolboxes especializados para machine learning, Deep learning y redes neuronales, este último facilita el desarrollo de las redes neuronales sin ser experto en el tema, y usa programación tradicional basado en códigos escritos para crear funciones y estructuras mucho más complejas (Shoelson 2018, p. 8). Por el contrario, SCILAB requiere conocimientos previos de programación para poder usarlo y su entorno gráfico no es de fácil entendimiento y LabVIEW usa lenguaje de programación de tipo grafico basado en diagramas de bloques y su enfoque es para adquisición de fatos, y tiene menos niveles de acceso y menor capacidad de procesamiento (Serrano 2019, p. 8).

3.1.6.1. Esquema metodológico general para la creación de la ARN

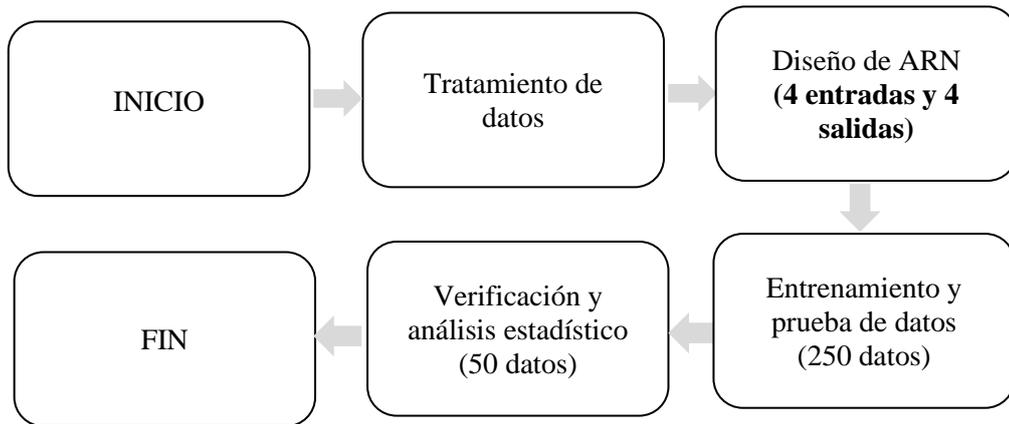


Ilustración 9-3: Esquema metodológico para la creación y validación de la ARN

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

La RNA se crea en el software MATLAB, que cuenta con una aplicación denominada “Neuronal Net Fitting” encargada de la creación y diseño de la RNA el cual cuenta con herramientas de análisis tal como: histograma de error y regresión lineal para evaluar el rendimiento. El primer paso, se ingresan las 4 variables de entrada: temperatura del flujo de alimentación (T1-EDC), flujo másico de la corriente de alimentación (FM1-EDC), flujo másico de la corriente de reposición (FM2-EDC) en la columna de ED, y ratio de reflujo de la torre de recuperación (RR-ERC), y 4 variables de salida: fracción molar de n-hexano como producto destilado (X_HE) y NMP como producto de fondo (X_NMP1) en la columna de destilación extractiva, fracción molar de acetato de etilo (X_AE) como producto destilado, y NMP de alta pureza (X_NMP2) como producto de fondo de la columna de reposición. Se debe ingresar las variables en el software en vector, entonces se transforma las columnas de la tabla de Excel en filas en el mismo orden como se muestra a continuación:

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P
1																
2	T1-EDC	50	78	130	97	107	27	106	49	22	54	40	89	145	22	118
3	RR-ERC	0.87	1.2	1.65	1.88	1.1	0.89	1.54	1.38	1.55	1.96	1.9	1.42	1.6	0.9	1.5
4	FMA-EDC	9706	9518	8278	9158	9816	9935	8409	8973	9766	9022	9478	8511	8844	9446	8037
5	FMO-EDC	69	67	16	17	29	22	50	83	5	62	73	45	83	54	79
6	X_HE	0.81102932	0.94872966	0.99604247	0.99480882	0.91373662	0.99995506	0.99543858	0.99294214	0.99998457	0.99544641	0.99429944	0.99444988	0.99592711	0.99996489	0.99612408
7	X_AE	0.75763282	0.68878690	0.67102827	0.61870669	0.69649028	0.48807540	0.67922139	0.68005526	0.47603881	0.61826961	0.60816986	0.69042578	0.67565431	0.50472037	0.69895151
8	X_NMP1	0.97547978	0.98300880	0.87247169	0.76745225	0.99227311	0.49252808	0.90761417	0.93668810	0.46317000	0.74510751	0.74696927	0.96695745	0.87665157	0.49669520	0.94040816
9	X_NMP2	0.99991602	0.99999621	0.99999875	0.99999937	0.99999362	0.99999904	0.99999860	0.99999799	0.99999973	0.99999946	0.99999946	0.99999778	0.99999872	0.99999836	0.99999810

Ilustración 10-3: Tabla de datos como vectores

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

Con la base de datos se ingresan al software “Matlab” a un conjunto de matrices los cuales corresponden a las salidas o variables de respuesta y datos de entrenamiento que son previamente normalizados o lo que es lo mismo: transformar los valores ya establecidos en un conjunto de datos que toman valores de 0 a 1 para poder obtener un entrenamiento más eficiente y preciso de la red, pero depende de la adaptación de los datos a dicho ajuste, caso contrario se realiza el diseño con datos sin normalizar.

3.1.7. Entrenamiento de la ARN

El algoritmo de entrenamiento es un parámetro importante para la creación de la ARN, debido a que se encarga de los cálculos matemáticos en el entrenamiento, se experimenta con cada algoritmo para encontrar el mejor ajuste al proceso de destilación extractiva asistida por recompresión de vapor para la separación de la mezcla azeotrópica N-Hexano/ Acetato de Etilo, MATLAB ofrece tres algoritmos matemáticos: Levenberg-Marquardt (LM), conocido como método de mínimos cuadrados amortiguados, usado para problemas genéricos de ajuste de curvas; Bayesian Regularization (BR), empujado en la resolución de problemas con base de datos de valores pequeños difíciles de procesar, y Scaled Conjugate Gradiente (SCG), destacándose por su velocidad de convergencia debido al uso de derivadas de segundo orden.

En esta fase la red debe pasar por 3 etapas; la fase de entrenamiento es encargada de preparar a la red neuronal artificial mediante el algoritmo de aprendizaje establecido, el cual se ajusta en función del error que se presente entre los datos de DWSIM y la RNA, la fase de validación mide la generalización de la red neuronal para detener la fase de entrenamiento cuando la generalización alcance un punto óptimo y estable, y finalmente la etapa de prueba proporciona el rendimiento de la RNA, mediante el uso de datos que no han sido empleados en la fase de entrenamiento y validación.

Para el proceso de aprendizaje de la red se emplea el 70% (175) de datos totales de 250 conjuntos de datos, mientras que el 30% (75) son usados en las etapas de validación y test para evaluar el nivel de aprendizaje de la ARN diseñada, estos valores suelen variar según los ajustes. En la Ilustración 11-3 se establece el porcentaje para cada etapa y el número de neuronas en la capa oculta de la red neuronal artificial, parámetro que determina la eficiencia en la predicción de las variables de salida. Y para hallar el número de neuronas ocultas optimas se realiza experimentos de prueba y error y se analiza tres parámetros; regresión lineal, diagrama de error y MSE obtenido.

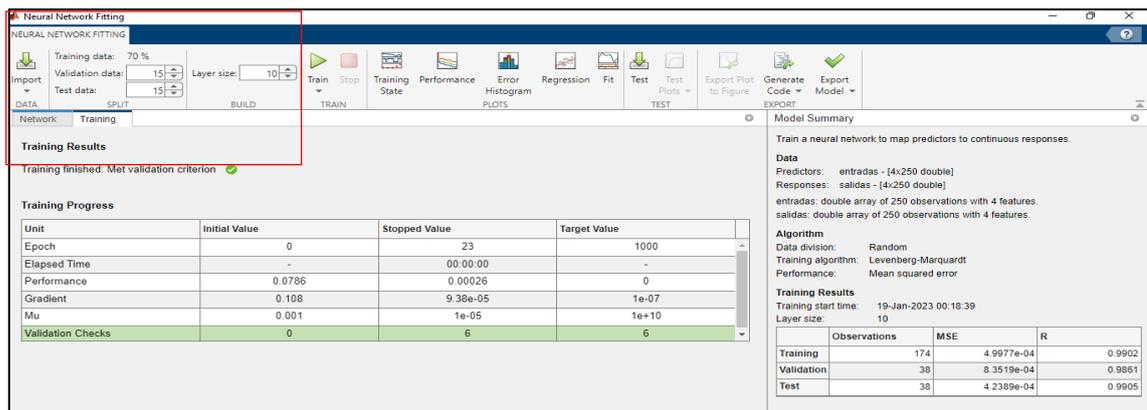


Ilustración 11-3: Porcentaje usado para el entrenamiento, validación y prueba y número de neuronas ocultas

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

3.1.8. Validar los resultados de la ARN

Una vez que se configura y entrena la ARN de manera óptima se emplea el coeficiente global de regresión (R) y el error cuadrático medio (MSE) en la predicción de las concentraciones de los productos de fondo y destilado, los cuales muestran la confiabilidad del proceso al obtener n-hexano y acetato de etilo de alta pureza. El Error Cuadrático Medio es uno de los criterios de evaluación más empleados en regresión en especial cuando se usa aprendizaje automático, mide la precisión de los modelos para un mismo grupo de datos, es decir, mide la diferencia entre el estimador y lo que se está estimando, dichos valores son positivos debido a la aleatoriedad (Schulze 2020, p. 12). Por otro lado, el valor de R se encarga de correlacionar los valores obtenidos y los propuestos, toma valores entre -1 y 1, cuando el valor es próximo o igual a 0 muestra que existe poca o ninguna relación lineal entre las variables, cuanto se acerca a 1 existe mejor grado de asociación del modelo a la variable que se pretende obtener y un coeficiente igual a 1 en valor absoluto indicaría una dependencia exacta entre las variables, cuando el valor es positivo muestra que existe una variación en el mismo sentido y cuando es negativo existe una asociación negativa, es decir, que van en sentido opuesto (Novales 2010, p. 12). Se realiza una validación extra de la ARN

con los 50 datos restantes de los 300 de la base de datos generada para comprobar la capacidad de la ARN para predecir las fracciones de los componentes de interés con nuevos datos de entrada, estos serán comparados con los valores de la simulación del proceso.

3.1.9. Análisis estadístico

Después de obtener la validación extra se realiza un análisis estadístico en donde compara los datos de productos destilados y de fondo obtenidos en la simulación del proceso en DWSIM con los valores predichos por la ARN en la fase de validación externa. Los resultados se valoran mediante el programa estadístico STATGRAPHICS Centurion XIX empleando la técnica de análisis de varianza o ANOVA. ANOVA es una herramienta estadística para prueba de hipótesis usada para examinar los datos experimentales, los resultados experimentales son estadísticamente significativos si se considera poco probable que este haya ocurrido por casualidad, ANOVA está basada en estadísticas y es una herramienta para toma de decisiones e identificar si existe variación dentro de los grupos de objetos probados, lo que permite probar adecuadamente la importancia de todos los factores principales y sus interacción cuando se compara el cuadrado medio con una aproximación de errores experimentales en niveles de confianza definidos (Vishwanatha et al. 2021, p. 2411).

CAPÍTULO IV

4. MARCO DE ANÁLISIS E INTERPRETACIÓN DE RESULTADOS

4.1. Resultados de la simulación en DWSIM

En la Ilustración 2-4 se detalla los resultados obtenidos de la simulación en DWSIM del proceso de separación de n-hexano y acetato de etilo por destilación extractiva asistida por recompresión de vapor y en la Ilustración 1-4 se muestra la disposición del proceso final. En este proceso se modificó la etapa de recompresión de vapor del proceso original ya que no se encuentra conectada directamente con el rehervidor de la columna EDC debido a que no existe una función directa que permita la adición de dos rehervidores capaces de conectarse con otros equipos, sin embargo, el rehervidor disminuye la temperatura de destilado que ingresa al compresor, por lo que, se asume un equipo de enfriamiento para cumplir con las condiciones propuestas de salida.

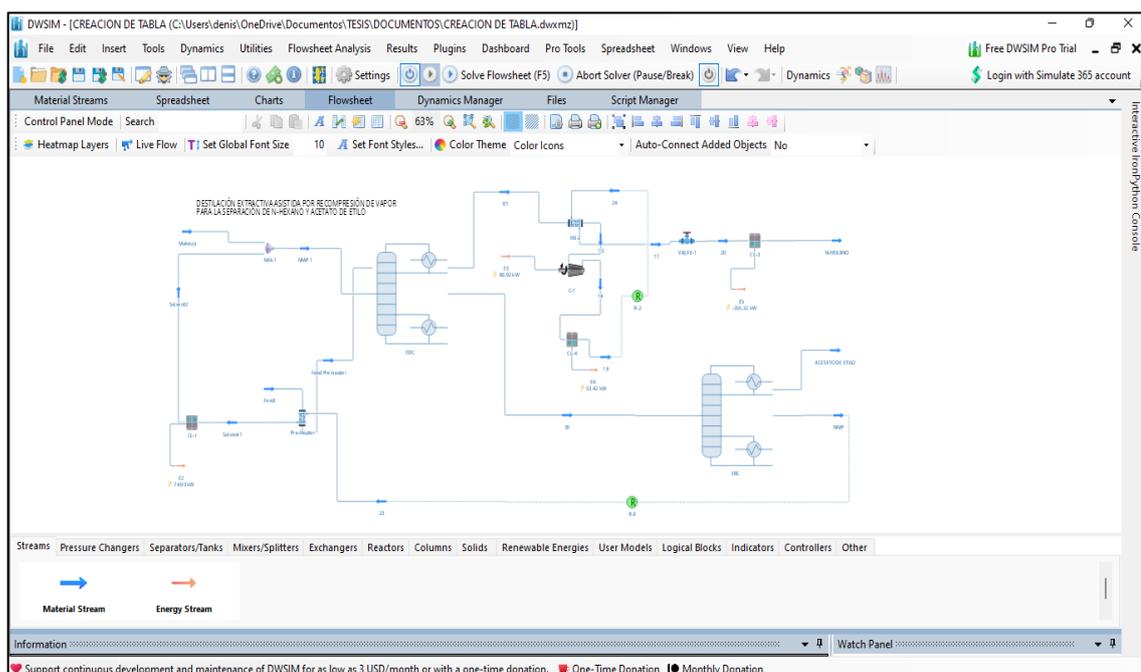


Ilustración 1-4: Simulación final del proceso de destilación extractiva para la separación de n-hexano y acetato de etilo

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

Make-up		N-HEXANO		ACETATO DE ETILO	
Object	Makeup	Object	N-Hexano	Object	Acetato de etilo
Temperature	25 C	Temperature	68.72 C	Temperature	42.7564 C
Pressure	1.2 bar	Pressure	1.01 bar	Pressure	0.28 bar
Mass Flow	0.38562 kg/h	Mass Flow	5393.77 kg/h	Mass Flow	2949.56 kg/h
Molar Flow	0.00389 kmol/h	Molar Flow	61.534 kmol/h	Molar Flow	33.4736 kmol/h
Molar Fraction (Liquid 1) / Ethyl acetate	0	Molar Fraction (Liquid 1) / Ethyl acetate	0.00867687	Molar Fraction (Liquid 1) / Ethyl acetate	0.999
Molar Fraction (Liquid 2) / N-hexane	0	Molar Fraction (Liquid 1) / N-hexane	0.991299	Molar Fraction (Liquid 1) / N-hexane	8.0762E-06
Molar Fraction (Mixture) / N-methyl-2-pyrrolidone	1	Molar Fraction (Liquid 1) / N-methyl-2-pyrrolidone	2.43141E-05	Molar Fraction (Liquid 1) / N-methyl-2-pyrrolidone	0.009991924

Feed		B1		NMP	
Object	Feed	Object	B1	Object	NMP
Temperature	25 C	Temperature	122.159 C	Temperature	12.7236 C
Pressure	1.2 bar	Pressure	1.2 bar	Pressure	0.23 bar
Mass Flow	8692.8 kg/h	Mass Flow	11899.2 kg/h	Mass Flow	8949.66 kg/h
Molar Flow	100 kmol/h	Molar Flow	124.32 kmol/h	Molar Flow	90.8462 kmol/h
Molar Fraction (Liquid 1) / Ethyl acetate	0.39	Molar Fraction (Liquid 1) / Ethyl acetate	0.399863	Molar Fraction (Liquid 1) / Ethyl acetate	0.0558402
Molar Fraction (Liquid 1) / N-hexane	0.61	Molar Fraction (Liquid 1) / N-hexane	2.2285E-06	Molar Fraction (Liquid 1) / N-hexane	7.4026E-05
Molar Fraction (Liquid 1) / N-methyl-2-pyrrolidone	0	Molar Fraction (Liquid 1) / N-methyl-2-pyrrolidone	0.690135	Molar Fraction (Liquid 1) / N-methyl-2-pyrrolidone	0.944016

Ilustración 2-4: Resultados obtenidos de las corrientes de entrada y salida

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

Los resultados de la simulación se muestra en la tabla 1-4, en donde se obtiene un destilado de n-hexano con 99.1299% de pureza y como producto de fondo una mezcla de NMP y acetato de etilo que contiene 69.0135 % y 30.986 % respectivamente, que ingresa a la columna ERC para la recuperación del solvente y destilación de acetato de etilo con pureza del 99.99% y NMP recuperado con contenido de 94.40% en pureza, los demás componentes de cada corriente se encuentran como trazas debido a que están presentes en cantidades muy pequeñas. Además las condiciones operativas de temperatura, presión, flujo masico y molar señalados en el estudio de Feng et al., (2020) son similares a los obtenidos en la simulación.

En la tabla 2-4 se muestran las principales propiedades obtenidas del área de recompresión, en donde el equipo principal de funcionamiento es el compresor que funciona a base del destilado de n-hexano obtenido al tope de la torre de destilación extractiva, el cual requiere de 221.95 kW para aumentar la presión del fluido de 1.02 hasta 4.84 bar, este equipo trabaja a una eficiencia del 80%.

Tabla 1-4: Resultados obtenidos de las corrientes en DWSIM

Propiedades de los flujos	Unidades	ENTRADAS		SALIDAS (COLUMNA EDC)		SALIDAS (COLUMNA ERC)	
		Make-up	Feed	N-HEXANO	B1	ACETATO DE ETILO	NMP
Temperatura	°C	25	25	68.72	122.159	42.7564	127.296
Presión	bar	1.2	1.2	1.01	1.2	0.28	0.33
Flujo Másico	kg/h	0.38562	8692.8	5303.77	11899.2	2949.56	8949.66
Flujo Molar	kmol/h	0.00389	100	61.534	124.32	33.4736	90.8463
Fracción molar (Líquido 1) /Acetato de Etilo	-	0	0.39	0.00867687	0.309863	0.9990	0.0559403
Fracción molar (Líquido 1) /N-hexano	-	0	0.61	0.991299	2.22865E-06	8.0762E-06	7.4036E-08
Fracción molar (Líquido 1) /NMP	-	1	0	2.43141E-05	0.690135	0.000991924	0.94406

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

Tabla 2-4: Resultados del funcionamiento del compresor obtenidos en DWSIM

Equipo	Compresor	
Propiedad	Valor	Unidad
Potencia requerida	221.946	kW
Presión de Salida	4.84	bar
Eficiencia	0.8	%

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

4.2. Validación de los resultados obtenidos en la simulación

Después de obtener los datos por simulación en DWSIM se validan los resultados obtenidos contrastándolos con un referente bibliográfico de base de Feng et al., (2020, p. 1) y se calcula el porcentaje de error entre estos datos. Para la validación se consideran únicamente los valores más relevantes y de interés como son los productos destilados y de fondo de cada torre, las trazas de cada flujo de salida no se consideran al ser valores muy pequeños. En la tabla 3-4 se presenta el error porcentual obtenido de las fracciones molares de interés que presentan valores, los cuales no debe exceder el 10% de error porcentual entre los valores obtenidos y los de literatura (Chuquin et al. 2021, p. 10).

Tabla 3-4: Validación de los resultados obtenidos en DWSIM

Columna	Identificación	Parámetro	Unidades	Aspen Plus [Feng, et al., 2020]	DWSIM	Error (%)
EXTRACTIVA	X_HE	N- Hexano (Destilado)	-	0.9990	0.991299	0.7770
	X_NMP1	NMP (Fondo)	-	0.7152	0.690135	3.6320
RECUPERACIÓN	X_AE	Acetato de etilo (Destilado)	-	0.999	0.9990	0.0000
	X_NMP2	NMP (Fondo)	-	0.9997	0.94406	5.8940

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

4.3. Balance de masa del sistema

4.3.1. Balance de masa en la torre de destilación extractiva

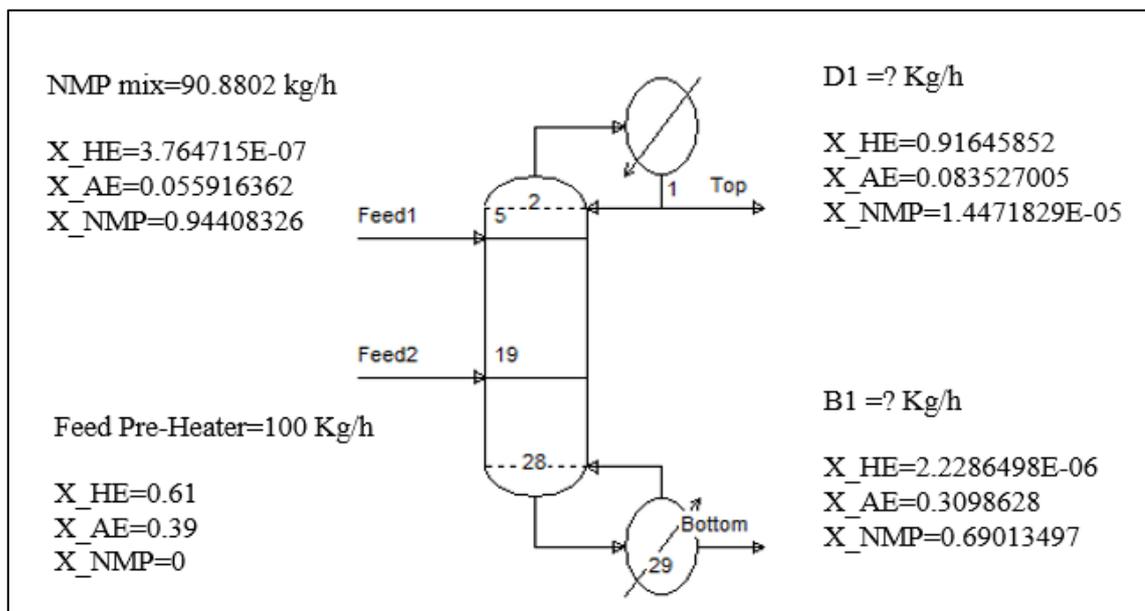


Ilustración 3-4: Diagrama de la columna de destilación extractiva para balance de masa

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

- **Balance general de masa:**

$$E = S$$

$$NMP \text{ mix} + Feed \text{ Pre - Heater} = D1 + B1 \quad (\text{Ec 1-4})$$

Donde:

NMP mix: Flujo molar de entrada a la columna EDC proveniente del mezclador, abreviada como NMPm

Feed Pre Heater: Flujo molar de entrada a la columna EDC precalentada, se abrevia como FPH

D1: Flujo molar de destilado

B1: Flujo molar de producto de fondo.

Por lo tanto, el balance general de masa es:

$$NMPm + FPH = D1 + B1 \quad (\text{Ec 2-4})$$

- **Balance de masa por componentes:**

- Balance de masa para el N-Hexano

$$NMPm * XHE_{NMPm} + FPH * XHE_{FPH} = D1 * XHE_{D1} + B1 * XHE_{B1} \quad (\text{Ec 3-4})$$

Donde:

XHE_{NMPm} = Fracción de N-hexano en la corriente de mezcla de ingreso NMPm

XHE_{FPH} = Fracción de N-hexano en la corriente de ingreso pre-calentada de alimentación

XHE_{D1} = Fracción de N-hexano en el destilado de la columna

XHE_{B1} = Fracción de N-hexano en el fondo de la columna

$$D1 = \frac{NMPm * XHE_{NMPm} + FPH * XHE_{FPH} - B1 * XHE_{B1}}{XHE_{D1}} \quad (\text{Ec 4-4})$$

- Balance de masa para el Acetato de Etilo

$$NMPm * XAE_{NMPm} + FPH * XAE_{FPH} = D1 * XAE_{D1} + B1 * XAE_{B1} \quad (\text{Ec 5-4})$$

Donde:

XAE_{NMPm} = Fracción de Acetato de Etilo en la corriente de mezcla de ingreso NMPm

XAE_{FPH} = Fracción de Acetato de Etilo en la corriente de ingreso pre-calentada de alimentación

XAE_{D1} = Fracción de Acetato de Etilo en el destilado de la columna

XAE_{B1} = Fracción de Acetato de Etilo en el fondo de la columna

$$D1 = \frac{NMPm * XAE_{NMPm} + FPH * XAE_{FPH} - B1 * XHAE_{B1}}{XAE_{D1}} \quad (\text{Ec 6-4})$$

Igualamos la ecuación 4-4 y la 6-4:

$$D1 = D1$$

$$\frac{NMPm * XAE_{NMPm} + FPH * XAE_{FPH} - B1 * XAE_{B1}}{XAE_{D1}} = \frac{NMPm * XHE_{NMPm} + FPH * XHE_{FPH} - B1 * XHE_{B1}}{XHE_{D1}}$$

Despejar B1:

$$B1 = \frac{(NMPm * XAE_{NMPm} * XHE_{D1}) + (FPH * XAE_{FPH} * XHE_{D1}) - (MPm * XHE_{NMPm} * XAE_{D1}) - (FPH * XHE_{FPH} * XAE_{D1})}{(XAE_{B1} * XHE_{D1}) - (XAE_{D1} * XHE_{B1})}$$

Reemplazando valores:

$$B1 = \frac{8953.02 \frac{kg}{h} * 0.916 * 0.055 + 8692.8 \frac{Kg}{h} * 0.916 * 0.39 - 8953.02 \frac{kg}{h} * 0.083 * 3.7 * 10^{-9} - 8692.8 \frac{Kg}{h} * 0.61 * 0.083}{0.309 * 0.916 - 0.083 * 2.22 * 10^{-6}}$$

$$\mathbf{B1 = 11896.896 \text{ kg/h}}$$

Despejando la ecuación 2-4 para obtener D1:

$$NMPm + FPH = D1 + B1$$

$$D1 = NMPm + FPH - B1$$

$$D1 = (8953.02 + 8692.8 - 11896.896) \frac{kg}{h}$$

$$\mathbf{D1 = 5746.924 \text{ kg/h}}$$

4.3.2. Balance de masa en la torre extractiva de recuperación de solvente

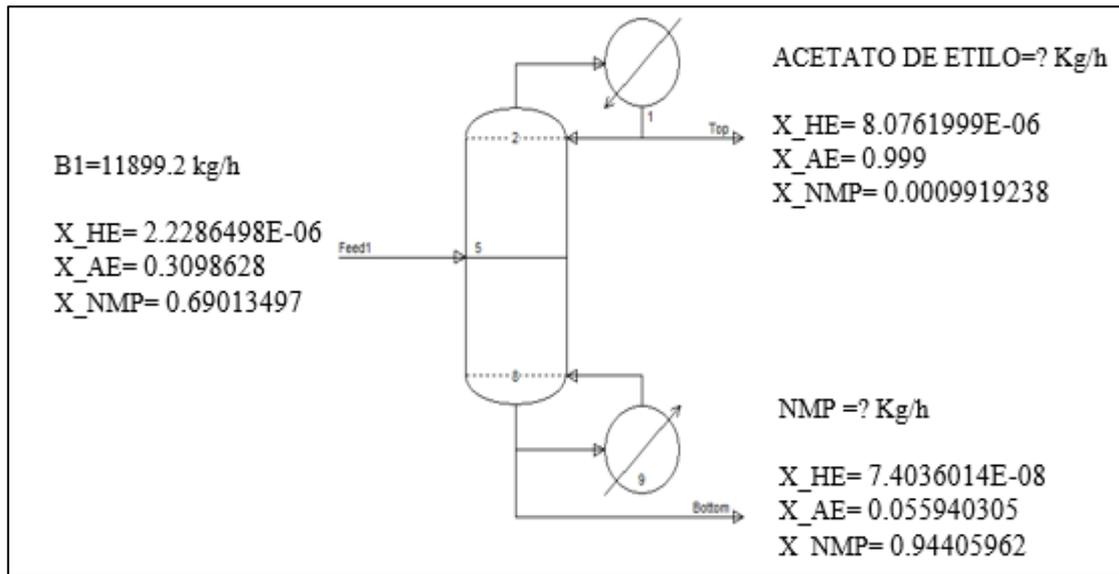


Ilustración 4-1: Diagrama de la columna de recuperación para balance de masa

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

- Balance general de masa:**

$$E = S$$

$$B1 = ACETATO DE ETILO + NMP \quad (\text{Ec 7-4})$$

Donde:

B1: Flujo molar de entrada a la columna ERC (producto de fondo de EDC)

ACETATO DE ETILO: Flujo molar destilado (abreviada como AE)

NMP: Flujo molar de fondo

Por lo tanto, el balance general de masa es:

$$B1 = AE + NMP \quad (\text{Ec 8-4})$$

- Balance de masa por componentes:**

- Balance de masa para el N-Hexano

$$B1 * X_{HE_{B1}} = AE * X_{HE_{AE}} + NMP * X_{HE_{NMP}} \quad (\text{Ec 9-4})$$

Donde:

XHE_{B1} = Fracción de N-hexano en la corriente de ingreso (B1) a ERC

XHE_{AE} = Fracción de N-hexano en el destilado de la columna ERC

XHE_{NMP} = Fracción de N-hexano en el fondo de la columna ERC

$$NMP = \frac{B1 * XHE_{B1} - AE * XHE_{AE}}{XHE_{NMP}} \quad (\text{Ec 10-4})$$

- Balance de masa para el Acetato de Etilo

$$B1 * XAE_{B1} = AE * XAE_{AE} + NMP * XAE_{NMP} \quad (\text{Ec 11-4})$$

Donde:

XAE_{B1} = Fracción de Acetato de Etilo en la corriente de ingreso B1 a ERC

XAE_{AE} = Fracción de Acetato de Etilo en el destilado de la columna

XAE_{B1} = Fracción de Acetato de Etilo en el fondo de la columna

$$NMP = \frac{B1 * XAE_{B1} - AE * XAE_{AE}}{XAE_{NMP}} \quad (\text{Ec 12-4})$$

Iguualamos la ecuación 10-4 y la 12-4:

$$NMP = NMP$$

$$\frac{B1 * XHE_{B1} - AE * XHE_{AE}}{XHE_{NMP}} = \frac{B1 * XAE_{B1} - AE * XAE_{AE}}{XAE_{NMP}}$$

Despejar AE:

$$AE = \frac{XAE_{NMP} * B1 * XHE_{B1} - XHE_{NMP} * B1 * XAE_{B1}}{XHE_{AE} * XAE_{NMP} - XAE_{AE} * XHE_{NMP}} \quad (\text{Ec 13-4})$$

Reemplazando valores:

$$AE = \frac{(11899.2 \frac{Kg}{h} * 0.055 * 2.2 * 10^{-06}) - (11899.2 \frac{kg}{h} * 7.40 * 10^{-08} * 0.309)}{(8.07 * 10^{-06} * 0.055) - (0.999 * 7.40 * 10^{-08})}$$

$$AE = 2948.48 \text{ kg/h}$$

Despejando la ecuación 8-4 para obtener NMP:

$$B1 = AE + NMP$$

$$NMP = B1 - AE$$

$$NMP = (11899.2 - 2948.48) \frac{kg}{h}$$

$$NMP = 8950.72 \text{ kg/h}$$

4.4. Resultados del análisis de sensibilidad

Se seleccionan las variables críticas que afectan los productos de interés cuando se modifican en las etapas de destilación extractiva y de recuperación de solvente. En la tabla 4-4 se presentan los equipos donde sus operaciones influyen directamente en la obtención de componentes de alta pureza, de las cuales cuatro variables de diseño inciden de manera significativa en la obtención de los compuestos.

Tabla 4-4: Variables empleadas en el análisis de sensibilidad

Enfoque		Identificación	Descripción	Unidades
Destilación	Extractiva	T1-F	Temperatura de entrada del flujo de alimentación	°C
		RR-EDC	Ratio de reflujo de la torre EDC	-
		FM1-F	Flujo másico de la corriente de alimentación	kg/h
		FM2-MU	Flujo másico de la corriente de reposición	kg/h
	Recuperación	T-B1	Temperatura del flujo de entrada B1 a ERC	°C
		RR-ERC	Ratio de reflujo de la torre ERC	-
FM-B1		Flujo másico de la corriente B1 (mezcla)	kg/h	
Salidas	X_HE	Fracción molar de n-hexano al tope de la columna	-	
	X_NMP1	Fracción molar de NMP al fondo de la columna	-	
	X_AE	Fracción molar de acetato de etilo al tope de la columna	-	
	X_NMP2	Fracción molar de NMP al fondo de la columna	-	

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

4.4.1. Resultados del análisis de sensibilidad en la columna de Destilación extractiva

En la columna de destilación extractiva (EDC) se aplican cuatro análisis de sensibilidad en las variables de diseño más relevantes: temperatura del flujo de alimentación, ratio de reflujo de la columna de destilación extractiva, flujo másico de la corriente de alimentación y flujo másico de la corriente de reposición. El estudio paramétrico se realizó desde la herramienta que cuenta ChemSep usando los diferentes rangos de funcionamiento con base a la simulación basada en DWSIM y datos proporcionados en el estudio de Feng et al., (2020,p.1)

Tabla 5-4: Análisis de sensibilidad para la Columna de Destilación Extractiva

Destilación Extractiva			
Numero de Análisis	Descripción	Variable independiente	Variable dependiente
1	Análisis del efecto de la temperatura de alimentación a la columna EDC	T1-F	X_HE X_NMP1
2	Análisis del efecto del ratio de reflujo en la columna EDC	RR-ERC	X_HE X_NMP1
3	Análisis del efecto del flujo masico de alimentación	FM1-F	X_HE X_NMP1
4	Análisis del efecto del flujo masico de reposición	FM2-MU	X_HE X_NMP1

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

4.4.1.1. Resultados del análisis 1

Los rangos establecidos para el análisis sobre el efecto de la temperatura de alimentación en la columna EDC fueron de 20-150 °C necesarios para evitar un sobrecalentamiento en el fluido de salida del solvente recuperado en el intercambiador de calor. Esta variable de diseño se toma como entrada para la ARN debido a que existe un cambio significativo en las fracciones de n-hexano y el NMP de fondo como se muestra en la Ilustración 5-4.

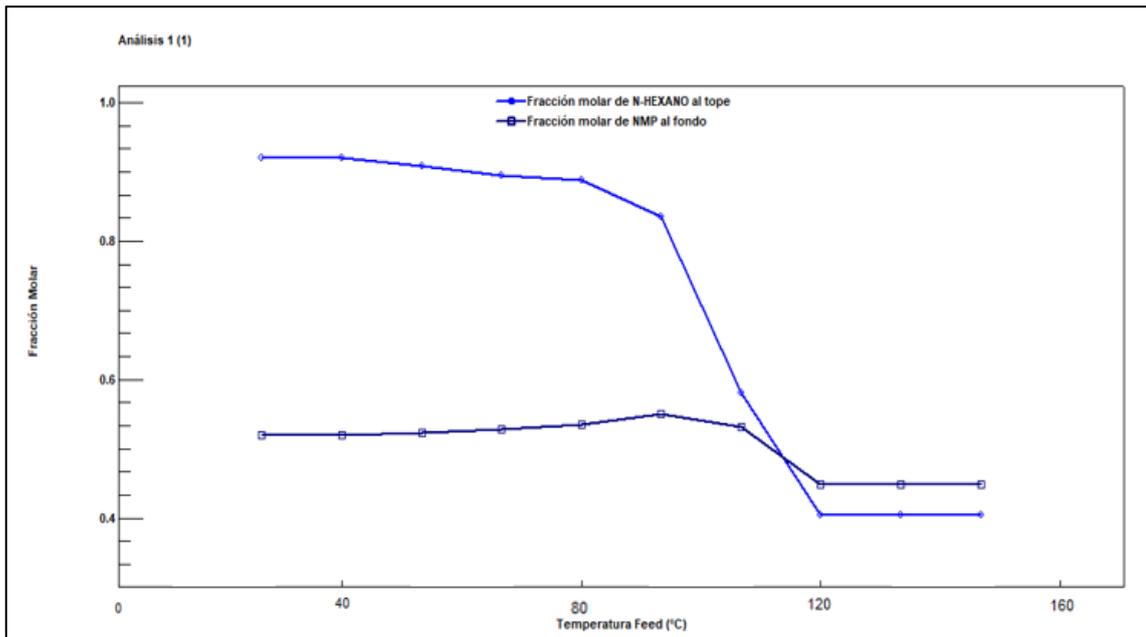


Ilustración 5-4: Resultados del análisis de sensibilidad 1

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

4.4.1.2. Resultados del análisis 2

Para el análisis del ratio de reflujo de la torre EDC se utilizó un rango de 0.7 a 2 con 10 repeticiones, en la ilustración 6-4 no presenta un aumento significativo de la fracción de N-hexano y NMP como producto de fondo, por lo que, se descarta como variable de entrada a la ARN.

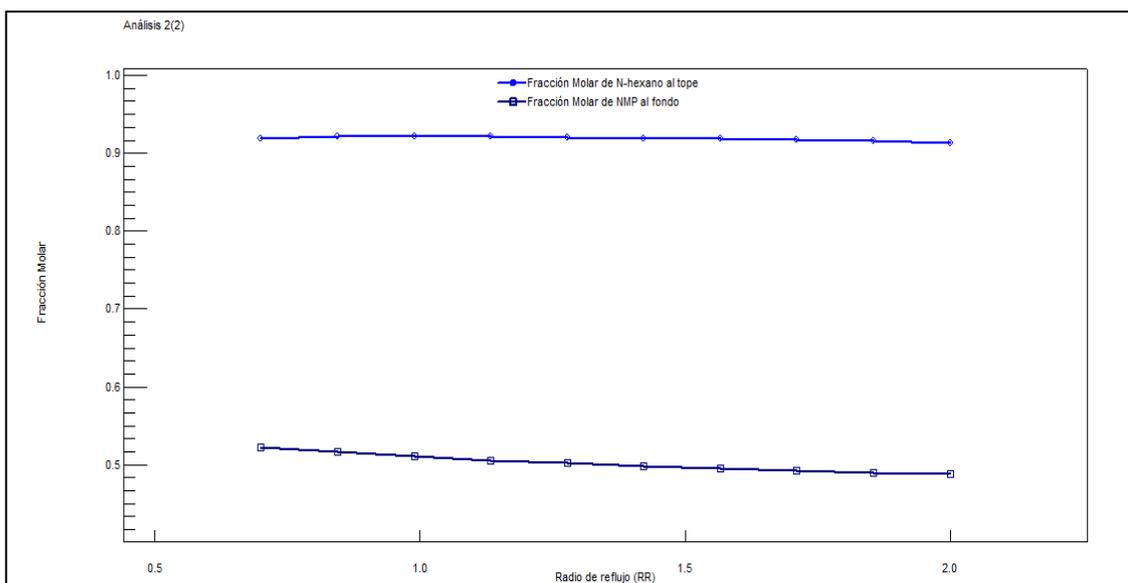


Ilustración 6-4: Resultados del análisis de sensibilidad 2

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

4.4.1.3. Resultados del análisis 3

Para el tercer análisis acerca del flujo másico alimentado se usa un rango de 8000 a 10000 kg/h, en la Ilustración 7-4 se muestra un aumento significativo de la fracción molar del NMP obtenido al fondo mientras que en el caso del n-hexano se observa una disminución de su composición al aumentar el flujo masico de alimentación, como existe un cambio significativo el flujo másico alimentado se toma como entrada a la ARN.

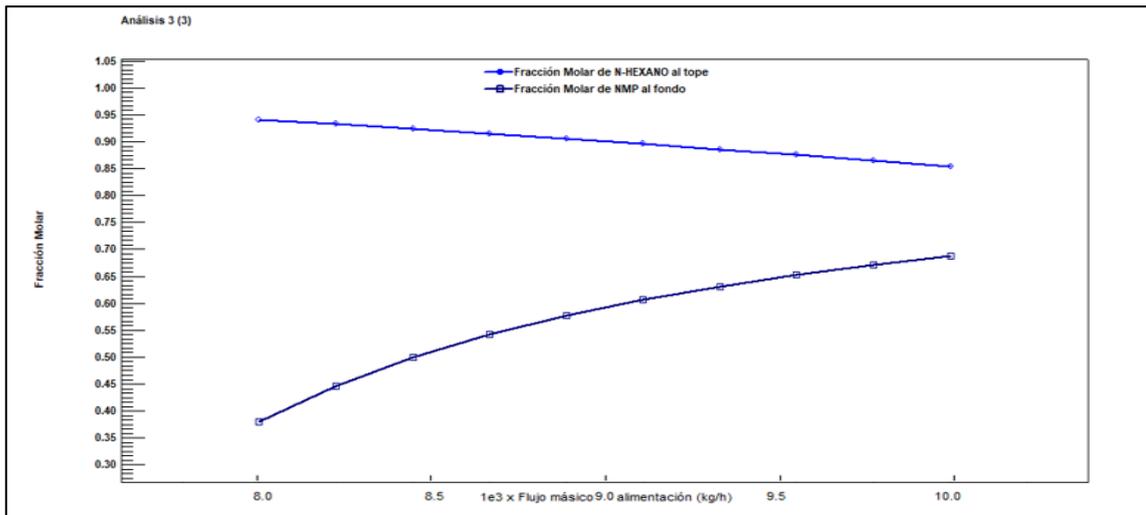


Ilustración 7-4: Resultados del análisis de sensibilidad 3

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

4.4.1.4. Resultados del análisis 4

Para el ultimo análisis en la columna de destilación extractiva se empleó un rango de 3 a 100 kg/h del flujo de reposición “make-up” que ingresa a la columna de ED, en la Ilustración 8-4 se observa que existe un aumento significativo en el producto tope de interés, sin embargo, en producto de fondo reduce su concentración, este es un parámetro elegido como entrada a la ARN.

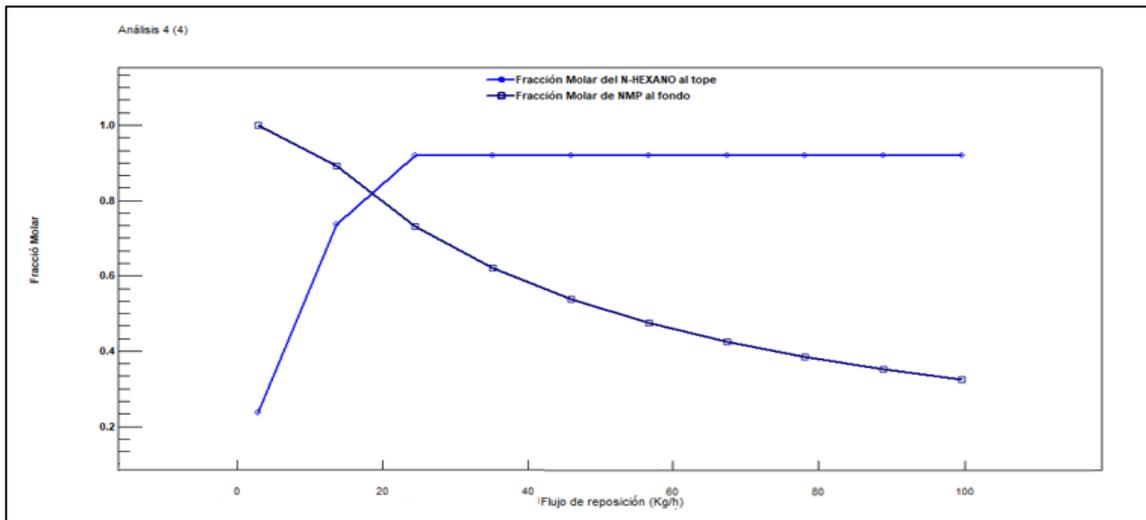


Ilustración 8-4: Resultados del análisis de sensibilidad 4

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

4.4.2. Resultados del análisis de sensibilidad en la columna de recuperación

En la columna de destilación de recuperación (ERC) se aplican tres análisis de sensibilidad en las variables de diseño más relevantes: temperatura del flujo de alimentación, ratio de reflujo de la columna de recuperación y flujo másico de la corriente B1. El estudio paramétrico se realizó desde la herramienta que cuenta ChemSep usando los diferentes rangos de funcionamiento con base a la simulación basada en DWSIM y datos proporcionados en el estudio de Feng et al., (2020, p.1).

Tabla 6-4: Análisis de sensibilidad para la Columna Extractiva de recuperación

Destilación Extractiva de Recuperación			
Numero de Análisis	Descripción	Variable independiente	Variable dependiente
5	Análisis del efecto de la temperatura de alimentación B1 a la columna extractiva de recuperación	T-B1	X_AE X_NMP2
6	Análisis del efecto del ratio de reflujo en la columna ERC	RR-ERC	X_AE X_NMP2
7	Análisis del efecto del flujo másico de alimentación B1	FM-B1	X_AE X_NMP2

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

4.4.2.1. Resultados del análisis 5

Para el primer análisis acerca de la temperatura de la corriente B1 de alimento a la torre ERC se empleó un rango de 100 a 120 °C, los resultados mostrados en la Ilustración 9-4 muestran que no existe un cambio significativo cuando se altera la alimentación de B1 para obtener acetato de etilo y el solvente NMP de alta pureza, por lo tanto, se descarta como variable de diseño para la ARN.

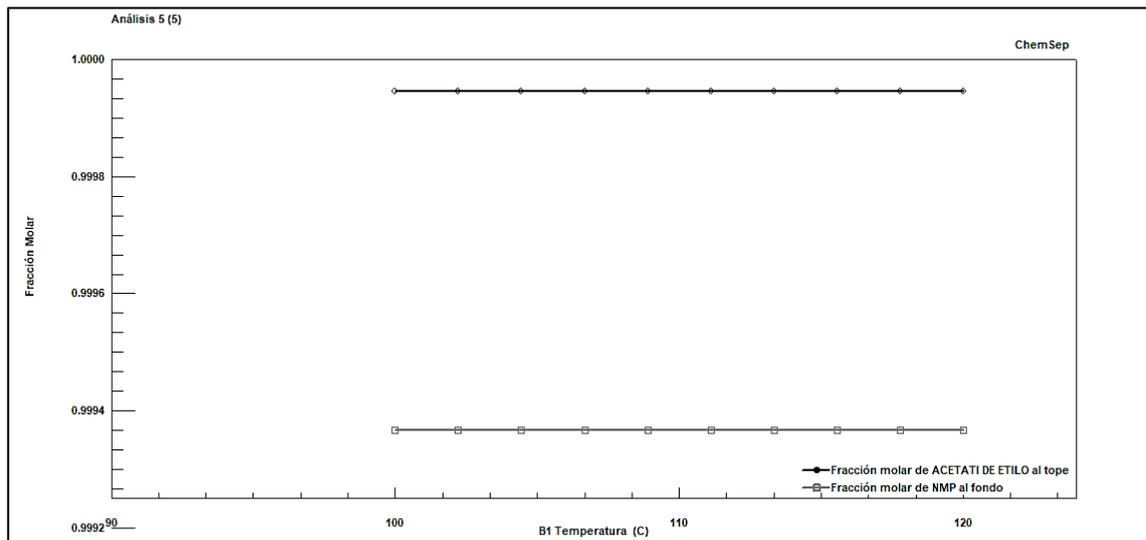


Ilustración 9-4: Resultados del análisis de sensibilidad 5

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

4.4.2.2. Resultados del análisis 6

Para el análisis sobre el ratio de reflujo de la columna de recuperación se usó un rango de 0.8 hasta 2, en la Ilustración 10-4 se muestra que existe variación en el incremento de las fracciones molares de interés, por lo que, se elige variable de entrada para la creación de la ARN.

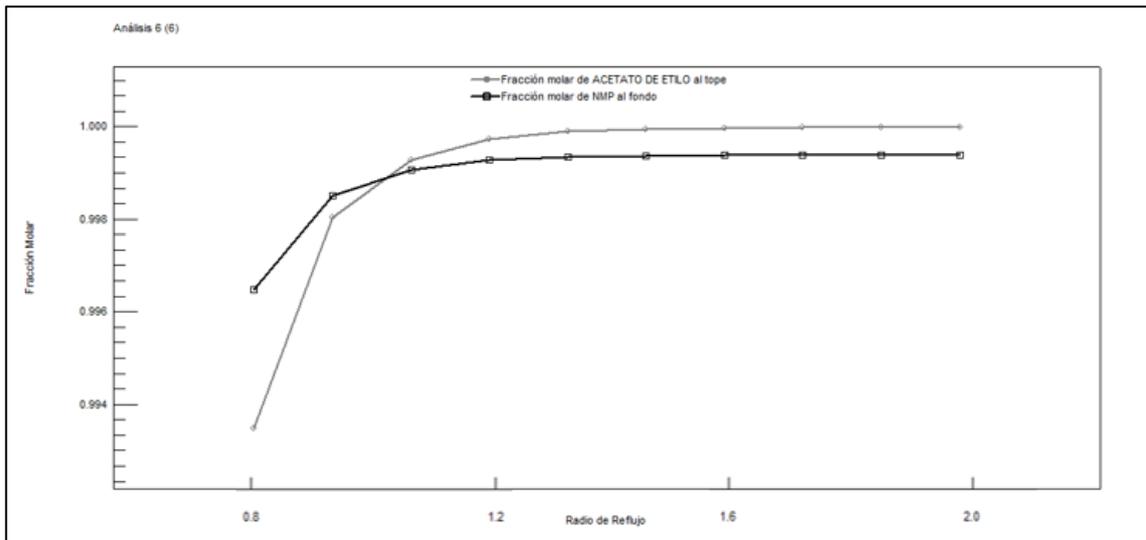


Ilustración 10-4: Resultados del análisis de sensibilidad 6

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

4.4.2.3. Resultados del análisis 7

Finalmente, para el ultimo análisis en la torre de recuperación extractiva se emplea un rango de 10000 a 20000 kg/h del flujo alimentado a la columna ERC, en la Ilustración 11-4 se muestra un valor constante del producto destilado y un bajo concentrado de NMP, dicha corriente afecta negativamente a recuperar el solvente con alta pureza, por lo que, no se elige de entrada a la RNA.

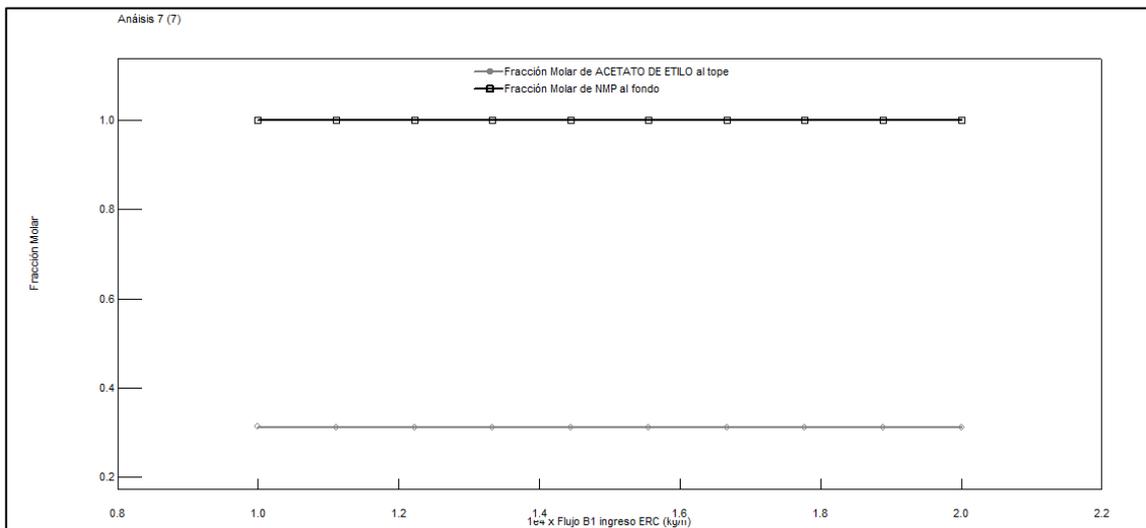


Ilustración 11-4: Resultados del análisis de sensibilidad 7

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

4.5. Resultados del entrenamiento de la ARN

Se usan los algoritmos disponibles en MATLAB los cuales se eligen en la línea 44 del código, además, el número de neuronas ocultas tienen valores desde 20 hasta 100, el número de capas ocultas se modifica en la línea 49 del código como se muestra en el Anexo B, y su eficiencia se evidencia por los parámetros MSE y R. Después del proceso de entrenamiento, los resultados se detallados en la tabla 7-4 concluyen que el más adecuado para la predicción de las fracciones de n-hexano y acetato de etilo es el modelo BR (MSE=2.5696E-07, R global=0.99397) cuando se usan 80 neuronas. La ventaja que presenta el algoritmo BR es la capacidad que posee para la predicción de relaciones complejas y su capacidad para tomar mejores decisiones.

Tabla 7-4: Resultados del entrenamiento de la ARN

N° neuronas	LM		BR		SCG	
	R global	MSE	R global	MSE	R global	MSE
20	0.98557	0.00088204	0.98993	0.00061599	0.95474	0.0029204
40	0.87213	0.033775	0.96584	0.00014727	0.86171	0.034919
60	0.95079	0.028693	0.98627	1.3693E-06	0.9208	0.037086
80	0.93000	0.02371	0.99397	2.5696E-07	0.76765	0.075626
100	0.89162	0.048859	0.99021	7.1245E-07	0.9356	0.03528

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

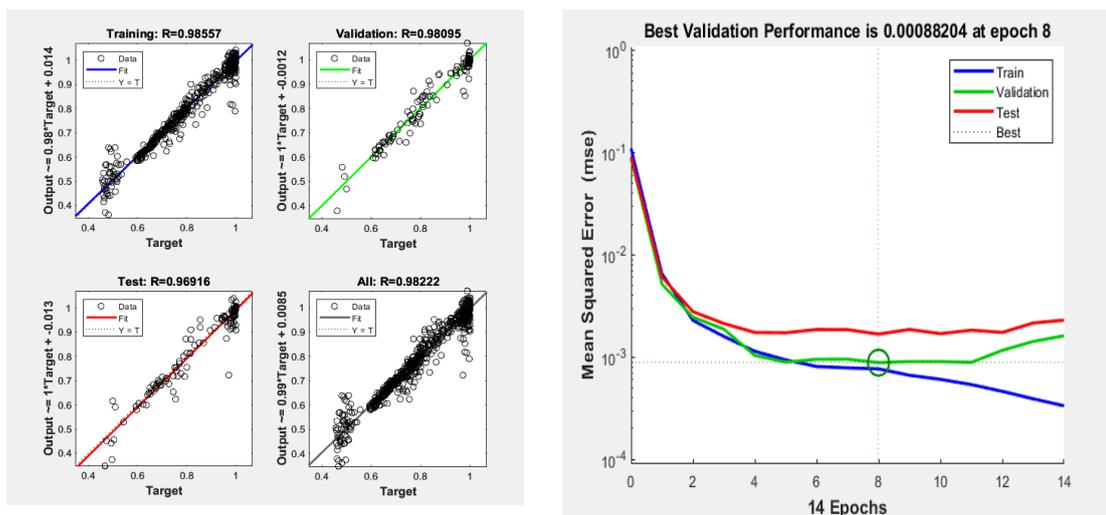
La tabla 8-4 muestra que los mejores valores de R se obtienen en las fases de entrenamiento, prueba, cuando se emplean 60, 80 y 100 neuronas. Para 60 neuronas, R es de 0.99997, 0.99999 para 80 y 100 en fase de entrenamiento, mientras que los valores de MSE para 60, 80 y 100 son 1.3693E-06, 2.5696E-07 y 7.1245E-07 respectivamente.

Tabla 8-4: Resultados del entrenamiento de la ARN

N neuronas	BR			
	R training	R testing	R global	MSE
20	0.99633	0.95745	0.98993	0.00061599
40	0.99913	0.82658	0.96584	0.00014727
60	0.99997	0.91372	0.98627	1.3693E-06
80	0.99999	0.96183	0.99397	2.5696E-07
100	0.99999	0.92429	0.99021	7.1245E-07

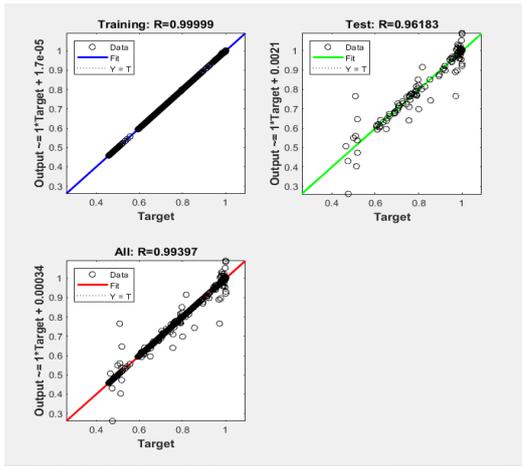
Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

Para tener una mejor elección del algoritmo se comparan los datos de R y MSE de los tres algoritmos que más se adecuen a las condiciones, para BR se toma el valor de las pruebas ya que este solo cuenta con dos etapas (Entrenamiento y prueba). La configuración óptima para los algoritmos LM y SCG fue 20 neuronas de capa oculta y para BR 80, de estos los mejores resultados presenta BR con $R=0.99397$ y $MSE=2.5696E-07$. Las Ilustraciones 12-4 (a), 12-4(c), 12-4(e) corresponden a los algoritmos de entrenamiento de LM, BR, SCG respectivamente, las cuales muestran el análisis con respecto a las salidas y el objetivo de entrenamiento, validación y prueba, el modelo BR muestra el mejor ajuste ya que las salidas de la red se aproximan al objetivo de $R=1$. Las ilustraciones 12-4(b),12-4(d), 12-4(f), muestran el error cuadrático frente al número de repeticiones de acuerdo al modelo usado para la ARN, dicho error se reduce cuando se somete a varios entrenamientos, el algoritmo termina cuando supera los límites del error máximo por cada repetición, por lo tanto, para el caso del algoritmo LM finaliza en 8, BR en 1000 y CGS en 29 repeticiones, BR ocupa más repeticiones y mayor tiempo para su entrenamiento, además, su valor de error cuadrático resulta ser el más bajo en comparación con los otros algoritmos.

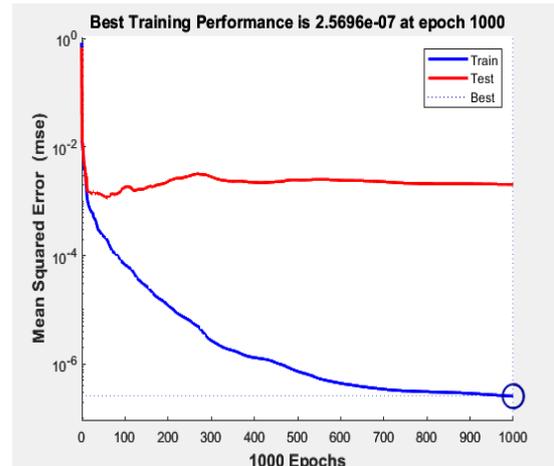


a)

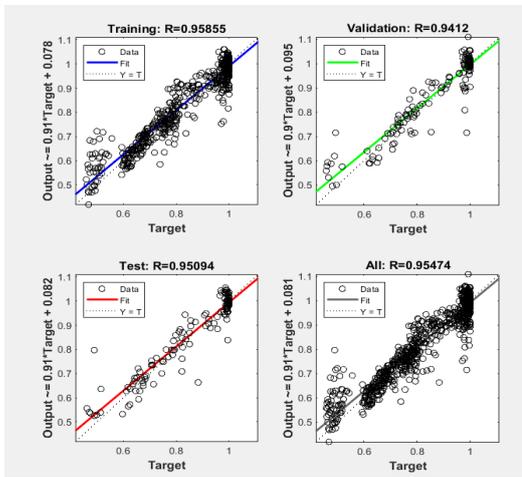
b)



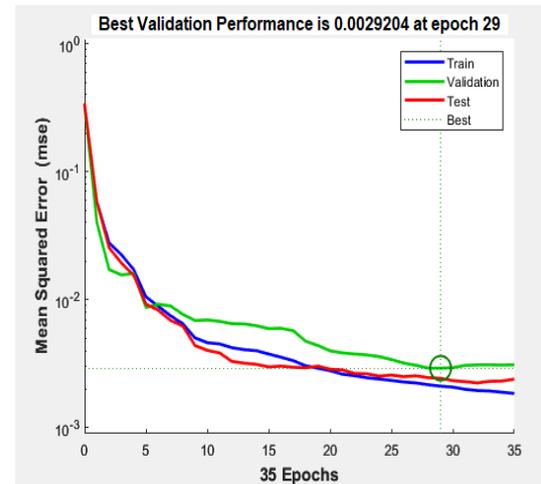
c)



d)



e)



f)

Ilustración 12-4: Comparación de algoritmos en base a R y MSE

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

4.5.1. Elección y desempeño de la ARN

Los resultados muestran que el modelo óptimo es BR con 80 neuronas en capa oculta, el algoritmo presenta R total de 0.99397 muy cercano a 1, representa una correlación lineal entre salidas y datos de entrada, y MSE cercano a 0. La tabla 9-4 muestra los valores de MSE para las fases de entrenamiento y prueba de la ARN, la fase de validación no muestra resultados debido a que la ARN que emplea algoritmos BR son modelos más vigorosos y tienen la capacidad de eliminar o reducir la validación aprovechando estos datos en la fase de entrenamiento. Los valores de MSE para el entrenamiento indican que la ARN tiene un comportamiento adecuado y las predicciones se están realizando con suficiente precisión. La estructura de la ARN está compuesta por cuatro entradas, con 80 neuronas de capa oculta y cuatro salidas.

Tabla 9-4: Error cuadrático medio de la ARN diseñada

N neuronas	BR	
	Train performance	Test performance
80	2.5696E-07	0.0020

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

La Ilustración13-4 por su parte muestra la evolución del MSE durante la fase de entrenamiento obteniendo un MSE final de 2.5696E-07, la función de desempeño MSE para datos de entrenamiento son muy cercanas a 0, mostrando la eficiente capacidad predictiva de la ARN.

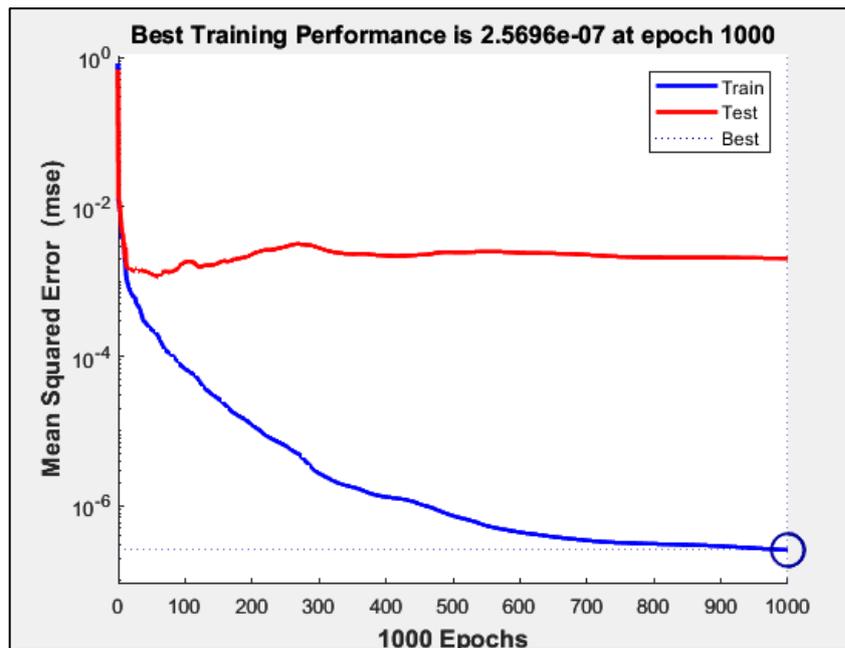


Ilustración 13-4: Rendimiento del entrenamiento de la ARN por MSE

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

Por otra parte, en la Ilustración 14-4 se muestra que no existe dispersión entre las salidas y los objetivos de la ARN en la fase de entrenamiento, pero en la fase de prueba si existe una pequeña dispersión cuyos valores de R son 0.99999 y 0.96183 respectivamente, y un valor de 0.99397 de R general, lo que muestra que los resultados tienen una correlación aceptable, cuanto más cerca se encuentre el valor de R a 1 el rendimiento de la ARN será mejor.

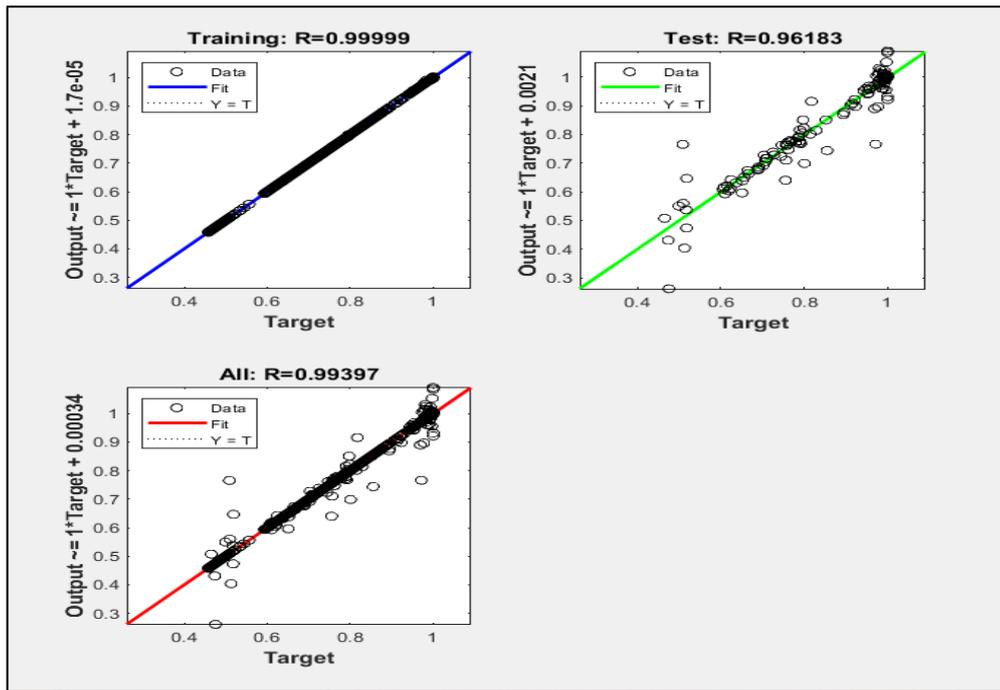


Ilustración 14-2: Coeficiente de regresión R para entrenamiento y prueba.

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

4.5.2. Resultados de predicción de datos de salida de la ARN

Las predicciones efectuadas por la ARN para las fracciones molares de n-Hexano, acetato de etilo, y NMP como producto de fondo y recuperado son muy precisos. Los resultados de predicción de la ARN se interpretan por gráficos en donde se comparan los resultados obtenidos en la simulación y los resultados proporcionados por la ARN. En el Anexo E se encuentran los resultados del error porcentual de los 250 datos empleados en el entrenamiento. Con base a las Ilustraciones 15-4, 16-4, 17-4 y 18-4 el error porcentual promedio de la predicción son: 0.572% para X_HE (producto destilado N-hexano) y 0.867% para X_NMP1 (NMP producto de fondo) en la columna de destilación extractiva, 1.313% para X_AE (Destilado de acetato de etilo) y 0.069% para X_NMP2 (NMP recuperado) en la columna de recuperación. En el análisis gráfico se evidencia que casi no existen valores dispersos o atípicos.

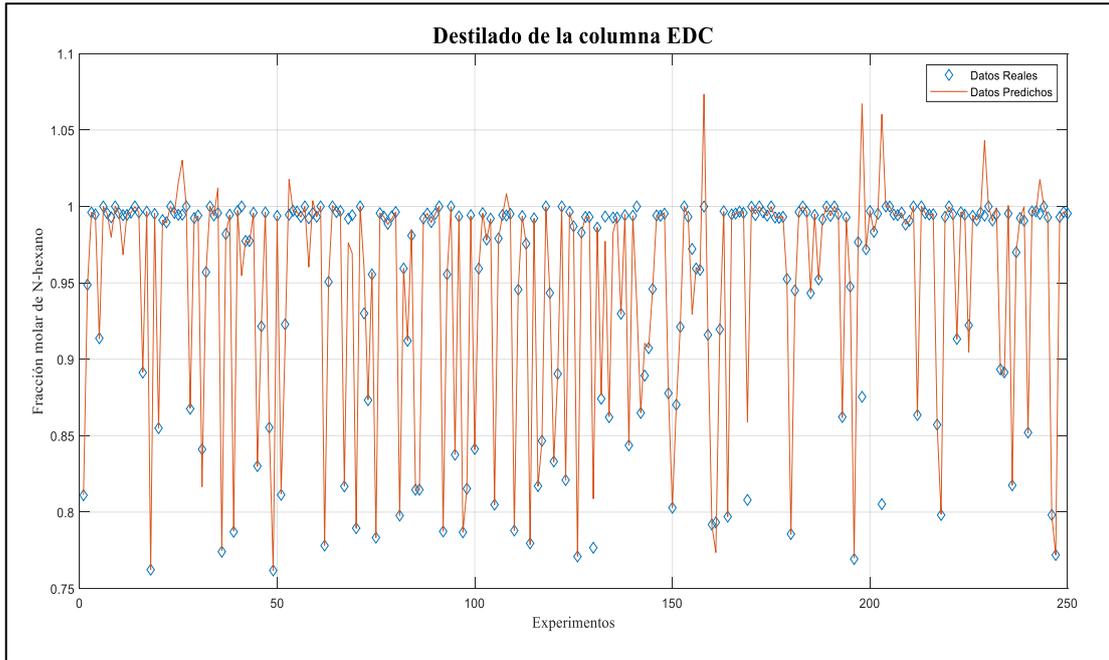


Ilustración 15-4: Comparación de los resultados en DWSIM (reales) y ARN (predichos) en la columna de destilación extractiva para obtener N-hexano

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

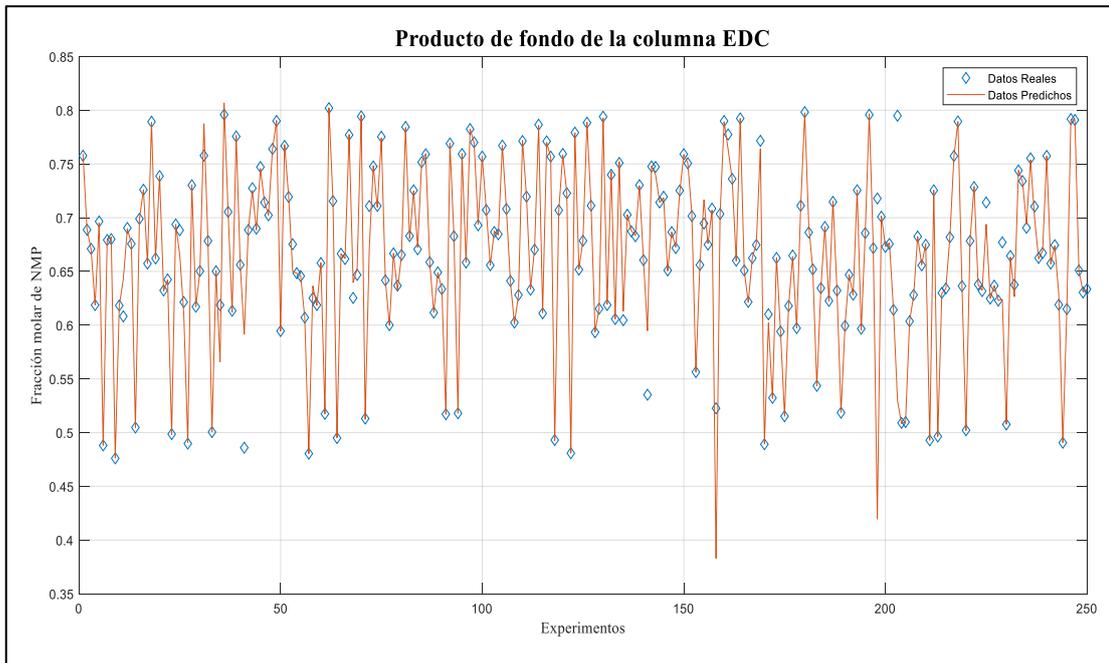


Ilustración 16-4: Comparación de los resultados en DWSIM (reales) y ARN (predichos) en la columna de destilación extractiva para obtener NMP

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

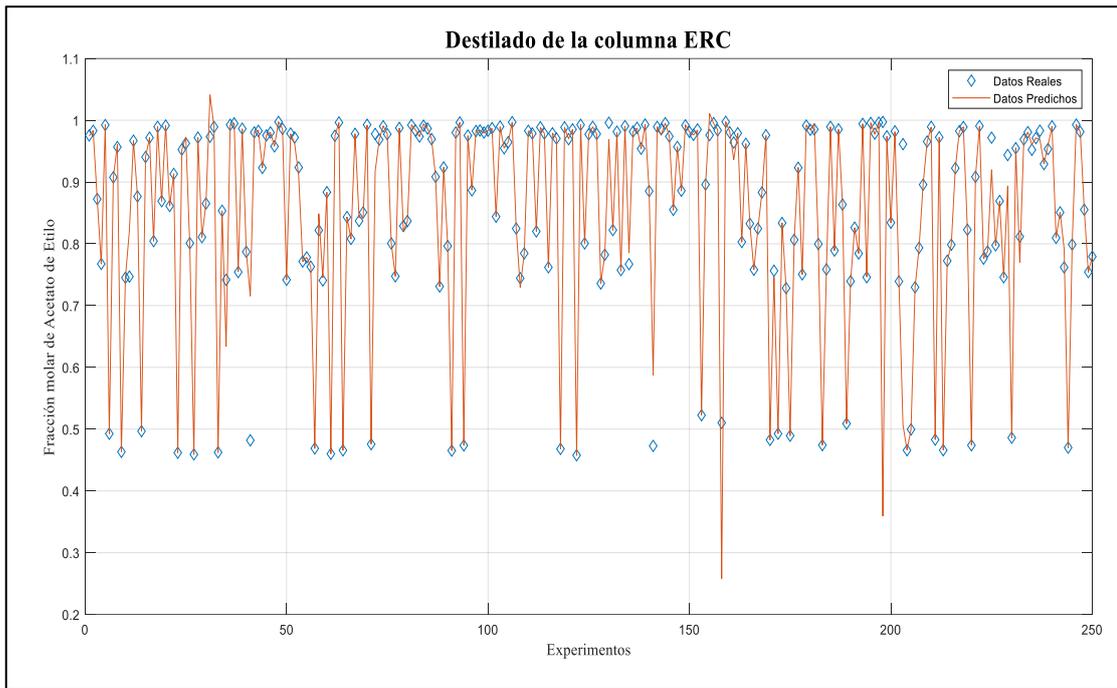


Ilustración 17-3: Comparación de los resultados en DWSIM (reales) y ARN (predichos) en la columna de recuperación para obtener AcEt

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

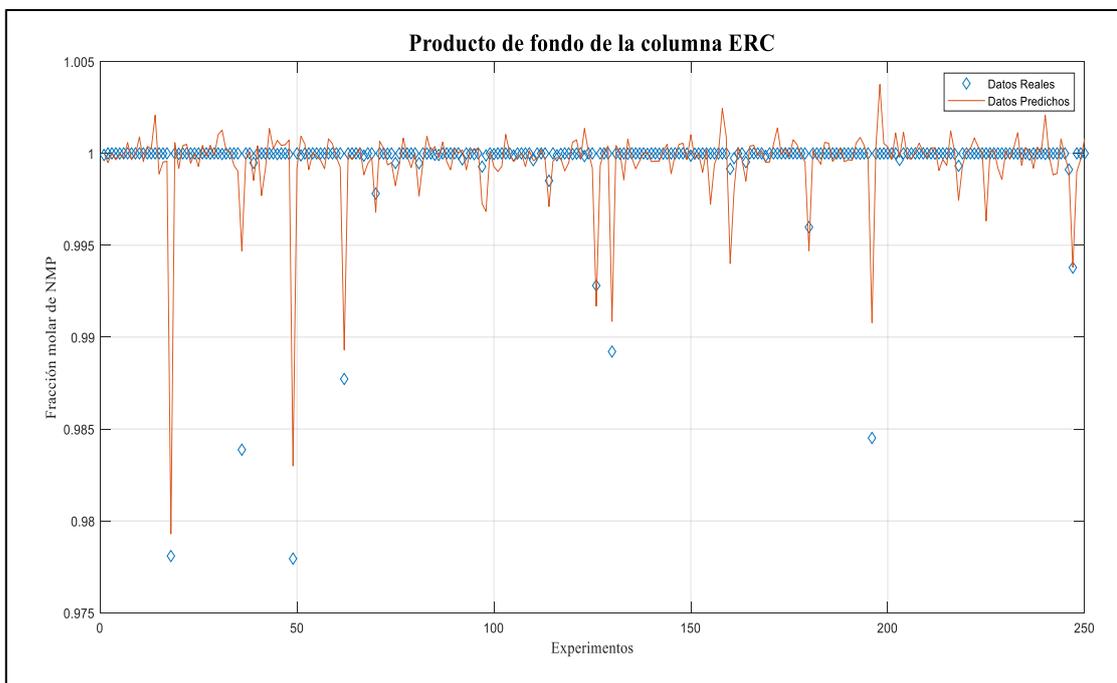


Ilustración 18-4: Comparación de los resultados en DWSIM (reales) y ARN (predichos) en la columna de recuperación para obtener NMP

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

4.6. Resultados de la validación externa

Se usaron los 50 datos restantes de los 300 en las Ilustraciones 19-4, 20-4, 21-4 y 22-4 indican la predicción de las fracciones molares de N-hexano, NMP al fondo de EDC, acetato de etilo y NMP al fondo de ERC respectivamente, mediante una comparación entre datos obtenidos de DWSIM y los predichos por la RMA se obtiene una correlación muy cercana con valores atípicos casi ausentes reflejados en los porcentajes promedios calculados. Como se muestra en el Anexo F para el caso de N-hexano se obtuvo un error porcentual medio de: 0.171%, de 1.386% para NMP como producto de fondo en la columna ED, 3,759% para el acetato de etilo como producto destilado y 0.0007% para la fracción de NMP recuperado en la torre de recuperación extractiva, como es evidente no existe la presencia de valores atípicos en el análisis gráfico.

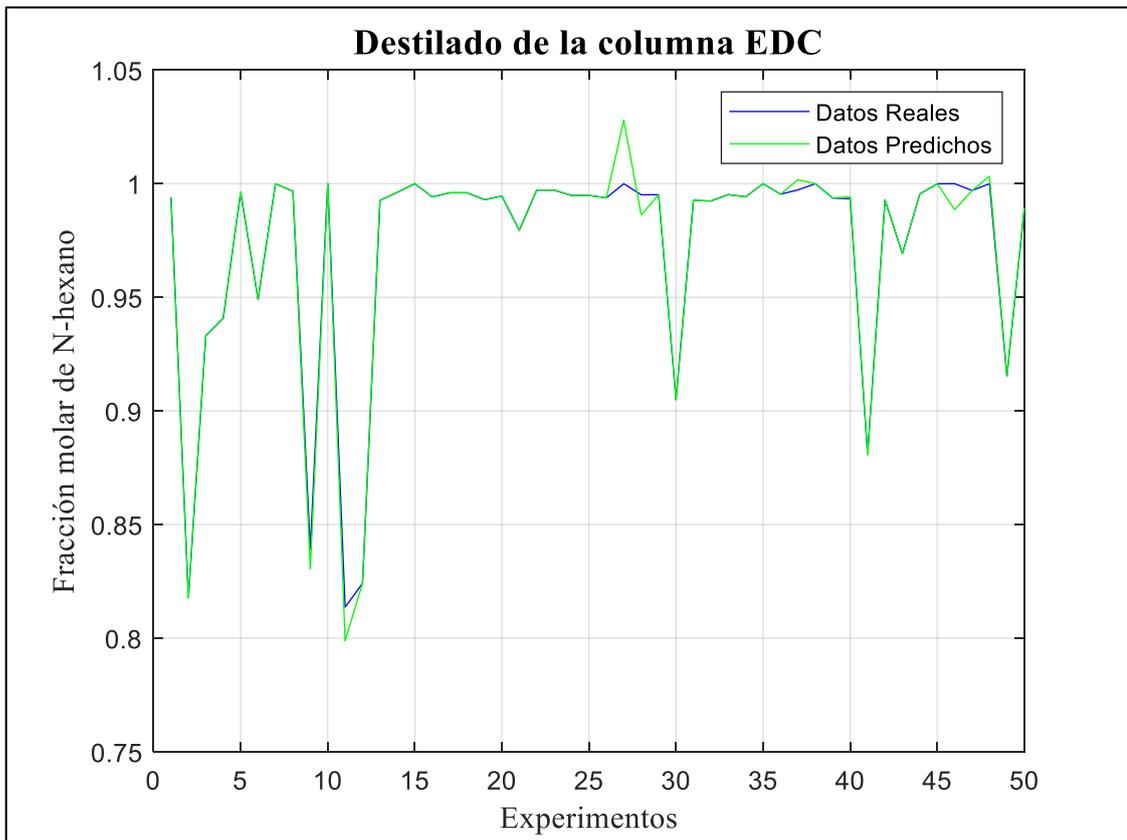


Ilustración 19-4: Fracción molar de N-hexano en la validación

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

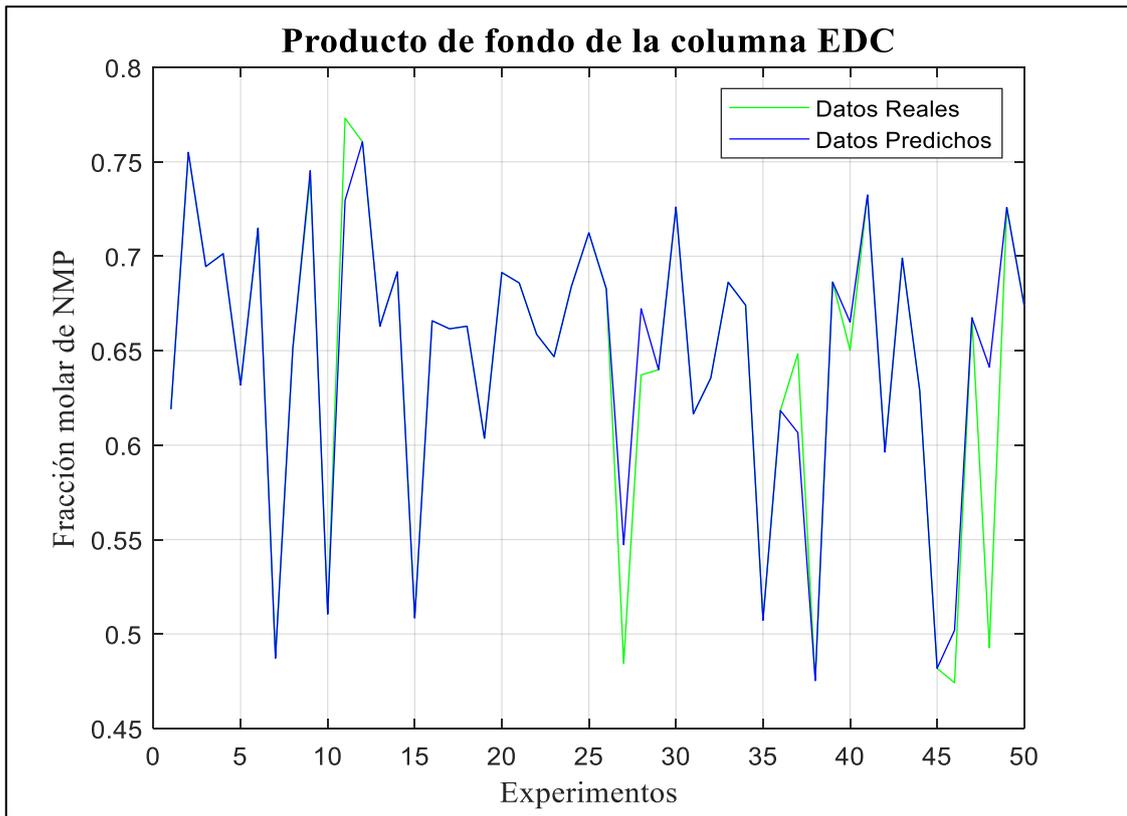


Ilustración 20-4: Fracción molar de NMP como producto de fondo en EDC en la validación

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

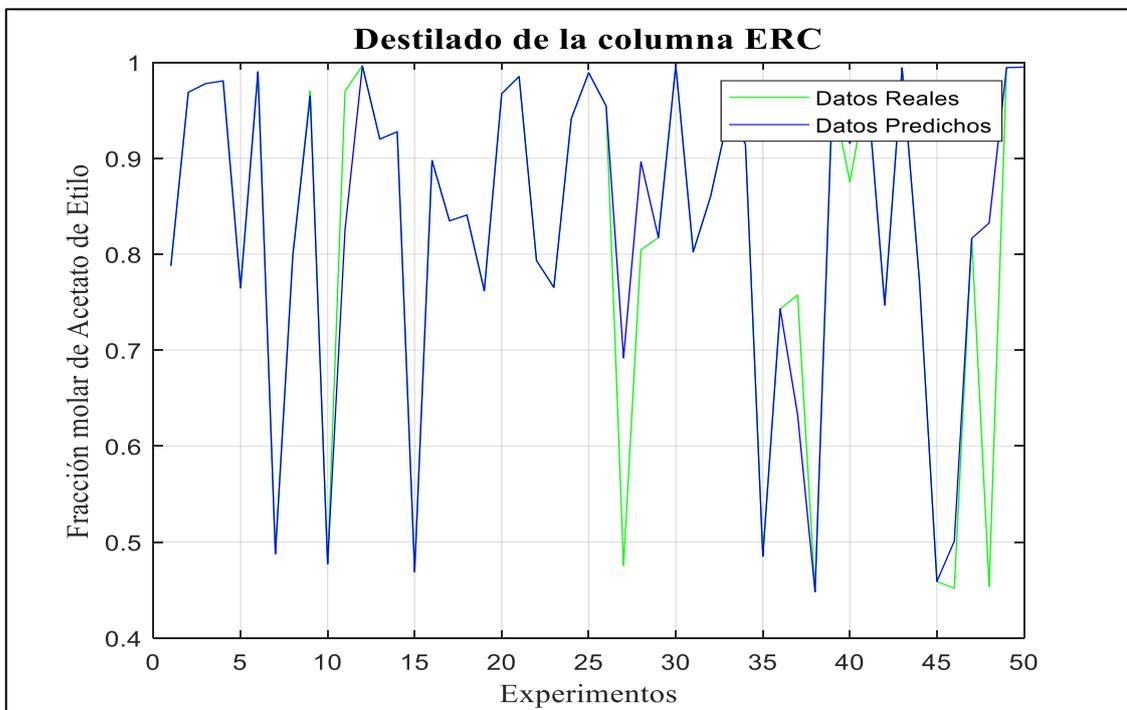


Ilustración 21-4: Fracción molar de Acetato de etilo en la validación

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

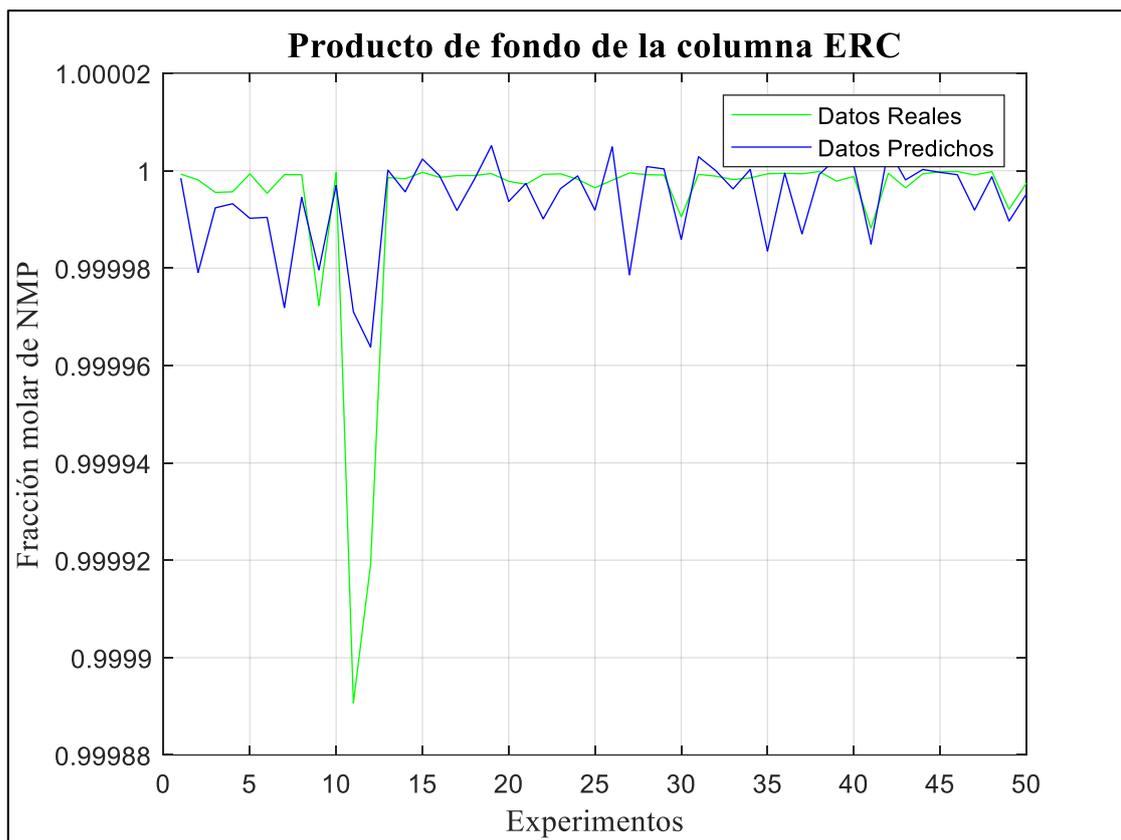


Ilustración 22-44: Fracción molar de NMP como producto de fondo en ERC en la validación

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

4.7. Resultados del análisis estadístico en STATGRAPHICS Centurion XIX

Este proceso compara los datos en 2 columnas del archivo de datos. Realiza diversas pruebas estadísticas y gráficas para establecer una comparación entre las muestras. La prueba-F en la tabla ANOVA determinará si existe diferencias significativas entre las medias, en caso de haberlas en las Pruebas de Rangos Múltiples se dará a conocer cuáles medias son significativamente diferentes de otras. En caso de la presencia de valores atípicos, se puede seleccionar la Prueba de Kruskal-Wallis la cual compara las medianas en lugar de las medias. Las diferentes gráficas permitirán determinar la significancia de los resultados, y a su vez, buscar posibles variaciones en el análisis de varianza. La tabla 10-4 muestra los resultados de ANOVA para cada fracción molar de producto en las columnas de destilación extractiva.

Tabla 10-4: Resultados del análisis estadístico usando STATGRAPHICS Centurion XIX

Fuente	Suma de cuadrados	GI	Cuadrado Medio	Razón-F	Razón-P
Fracción Molar de N-hexano en el destilado de la columna EDC					
Entre grupos	5.34207E-7	1	5.34207E-7	0.00	0.9889
Intra grupos	0.268231	98	0.00273705		
Total (Corr.)	0.268231	99			
Fracción Molar de NMP en el fondo de la columna EDC					
Entre grupos	0.000431299	1	0.000431299	0.07	0.7912
Intra grupos	0.599576	98	0.00611813		
Total (Corr.)	0.600008	99			
Fracción Molar de AcEt en el destilado de la columna ERC					
Entre grupos	0.00250815	1	0.00250815	0.08	0.7779
Intra grupos	3.07393	98	0.0313666		
Total (Corr.)	3.07644	99			
Fracción Molar de NMP en el fondo de la columna ERC					
Entre grupos	4.04369E-11	1	4.04369E-11	0.19	0.6612
Intra grupos	2.05112E-8	98	2.09298E-10		
Total (Corr.)	2.05516E-8	99			

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

La tabla ANOVA separa la varianza de los datos en dos partes: un componente entre grupos y otro dentro de grupos. La razón-F, que en el caso de predicción de la fracción molar del N-hexano es igual a 0.000195176, cuyo valor es el cociente entre el estimado del componente entre grupos y el estimado dentro-de-grupos, debido a que el valor-P de la razón-F es mayor o igual que 0.05, muestra que no existe una diferencia estadísticamente significativa entre las medias de las 2 variables con un nivel del 95.0% de confianza.

Lo mismo sucede para el caso de los datos para predicción de NMP como producto de fondo en la columna de destilación extractiva, de destilado de Acetato de etilo y NMP al fondo de la ERC se obtuvieron valores de razón-F igual a 0.0704954, 0.0799623 y 0.193202, respectivamente, en donde se obtiene que el valor-P de la razón-F es mayor 0.05, por lo tanto, no se encuentran diferencias significativas entre las medias de los datos observados y predichos por la ARN con un nivel del 95% de confianza. Las pruebas estadísticas muestran que la ARN diseñada y entrenada es válida para la predicción de fracciones molares de N-hexano, NMP (producto de fondo EDC), acetato de etilo y NMP (producto de fondo ERC) con un nivel de confianza del 95%

4.8. Análisis de optimización del proceso

Para conocer los parámetros óptimos del proceso de destilación extractiva por recompresión de vapor se comparan los resultados obtenidos de la simulación y se eligen los puntos más altos de cada fracción molar de los compuestos de interés, se utiliza Excel para hallar el valor máximo de la fracción molar con su respectivo número de entrenamiento y una vez obtenido los experimentos con las condiciones que permiten obtener una concentración de alta pureza de cada componente se comparan los tratamientos y se elige el que se encuentre más cercano a obtener componentes de elevada pureza. En la Ilustración 23-4 para el caso del N-hexano en la torre de destilación extractiva las condiciones adecuadas para obtener mayor pureza de N-hexano se da en el experimento 191 cuando la pureza alcanza un valor de 0.99999950.

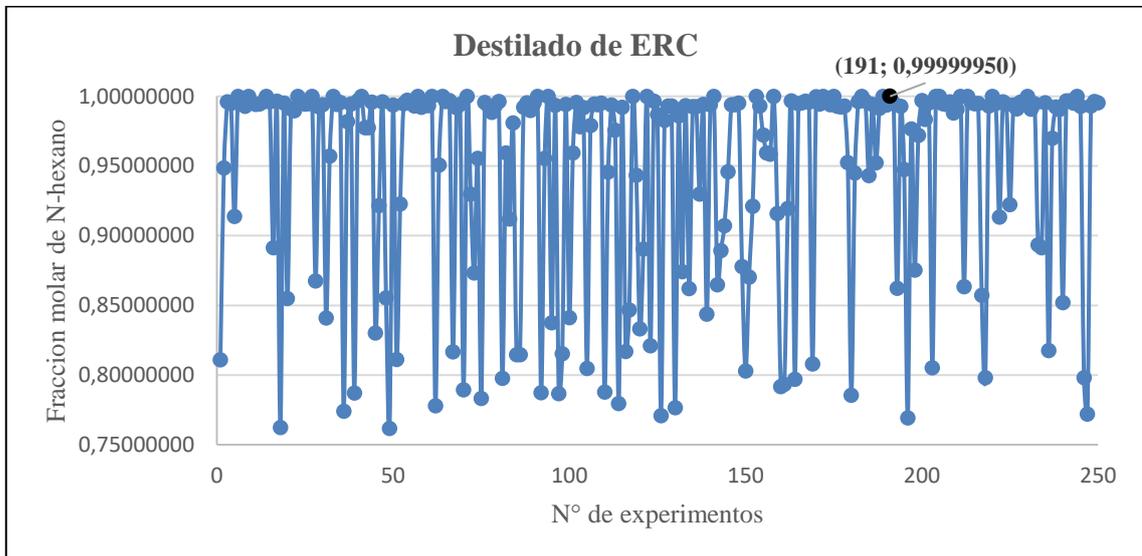


Ilustración 23-4: Valor óptimo de la fracción molar de N-hexano

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

Para la fracción de NMP al fondo de EDC toma un valor máximo de 0.80193374 en el experimento 62, la pureza en esta etapa mejora la obtención de acetato de etilo como producto destilado en la columna ERC. Por otro lado, en el experimento 159 se obtiene una pureza de 0.99750663 de Acetato de etilo como producto destilado de la columna ERC, y finalmente se obtiene una pureza del 0.99999988 de NMP recuperado en la torre ER en el experimento 19.

En la Tabla 11-4 se aprecia los cuatro experimentos con las condiciones de operación que proporcionan valores máximos de las fracciones molares de N-hexano, NMP como producto de fondo de la columna ED, Acetato de etilo como producto destilado de la columna ER y NMP como producto de fondo de la columna ER.

Tabla 11-4: Resultados de los experimentos que proporcionan valores altos de pureza de las fracciones de interés

N ^o	Experimentos	Temperatura de Alimentación	Ratio de Reflujo torre ER	Flujo másico de alimentación	Flujo másico de reposición	Fracción molar de N-Hexano	Fracción molar de NMP al fondo de EDC	Fracción molar de Acetato de Etilo	Fracción molar de NMP al fondo de ERC
1	19	106	1.6	8690	48	0.99506649	0.66208431	0.86902438	0.99999988
2	62	77	0.9	8059	50	0.77808430	0.80193374	0.97491536	0.98772336
3	159	42	1.13	9427	9	0.91595511	0.70347115	0.99750663	0.99999312
4	191	132	1.69	8867	61	0.99999950	0.64681642	0.82611814	0.99999907

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

De acuerdo a las fracciones molares de interés si se desea obtener N-hexano las condiciones operativas del experimento 191 serían las ideales, es decir, de acuerdo al producto que se desea obtener se dan los cuatro experimentos, sin embargo, si el objetivo es extraer los cuatro productos con la mayor pureza posible el experimento 159 es el más óptimo de todos para cumplir con dicho objetivo, y el estudio está enfocado en la separación únicamente de N-hexano y acetato de etilo por lo que al comparar el experimento 159 y 191 se obtiene que las condiciones del experimento 159 se adapta más al objetivo.

CAPÍTULO V

5. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

5.1. Conclusiones

- Se desarrolló una Red Neuronal Artificial para el control de la destilación extractiva asistida por recompresión de vapor en la separación de n-hexano y acetato de etilo. En primer lugar, se simuló el proceso utilizando DWSIM para evaluar las ventajas de este simulador sobre otros comerciales. Posteriormente, se construyó una base de datos para entrenar la RNA utilizando MATLAB. Finalmente, se construyó un modelo capaz de predecir las fracciones molares en estudio con un error promedio del 0.93%.
- Se estableció los parámetros de funcionamiento del sistema, por un lado la torre de destilación extractiva funciona con ratio de reflujo de 0.76, y calor eliminado de 138 KW a 1 atm de presión, y la columna de destilación de recuperación de disolvente con ratio de reflujo de 0.26 y fracción molar de NMP de 0.99 como producto de fondo a una presión de 1 atm.
- Se validó la simulación del proceso de destilación extractiva asistida por recompresión de vapor mediante un referente bibliográfico de alto impacto, y se obtuvo un error porcentual de 0.7770 %, 3.6320 %, 0.0 % y 5.8940 % para las fracciones de N-hexano, NMP al fondo EDC, Acetato de Etilo y NMP al fondo de ERC respectivamente. Los porcentajes de error obtenidos no superan el 10%, lo que indica que la simulación es adecuada para el proceso.
- Se diseñó una RNA que permitió predecir las fracciones molares de los productos de cada columna en el sistema de destilación, la cual cuenta con 4 entradas: temperatura de flujo de alimentación, ratio de reflujo de la torre de destilación de recuperación de disolvente y los flujos máscicos de alimentación y reposición que ingresan al sistema, 80 neuronas en capa oculta y 4 salidas, que corresponden a los productos destilados: N-hexano como producto destilado en ERC, NMP obtenido al fondo en EDC, acetato de etilo y NMP obtenido en ERC, Los indicadores de desempeño de la ARN diseñada fueron: $R = 0.99$ y $MSE = 2.56E-07$.
- Se validó el funcionamiento de la RNA mediante un análisis de varianza (ANOVA) empleando 50 pares de datos que no se utilizaron durante el proceso de entrenamiento. En todos los análisis efectuados, se observó que el valor-p fue mayor a 0.05, lo que indica que no existe una diferencia significativa entre los valores experimentales y los datos predichos por la RNA con un intervalo de confianza del 95%. Este resultado sugiere que la capacidad predictiva de la ARN es adecuada para la predicción de las fracciones molares analizadas durante el proceso.

- Se realizó un análisis de optimización del proceso y se obtuvo que para la predicción de fracciones molares de alta pureza de N-hexano y Acetato de Etilo el experimento adecuado debe tener las condiciones de 159 °C de temperatura del flujo de alimentación de entrada, 1.13 de ratio de reflujo de la torre ER, 9427 kg/h de flujo másico de alimentación y 9 kg/h de flujo másico para la corriente de reposición con el fin de obtener 91.595511 % de N-hexano y 0.9975066% de Acetato de Etilo, ambos de elevada pureza.

5.2. Recomendaciones

- Se recomienda emplear otros simuladores que cuenten con más alternativas para adaptar el proceso lo más similar al propuesto, especialmente en las torres de destilación extractiva para agregar más componentes como rehervidores o intercambiadores de calor, lo que permitirá tener una réplica exacta del proceso.
- Se debe realizar un análisis de costos del proceso industrial para la obtención de N-hexano ya que siempre se busca reducir los costos operativos que conlleva la separación de azeótropos como el N-hexano y Acetato de Etilo para que suponga una ventaja comercial para las industrias enfocadas a emplear destilación extractiva asistida por recompresión para la obtención de solventes.
- El entrenamiento de las redes neuronales son una etapa fundamental para la predicción de las fracciones molares de interés, por lo tanto, en este paso se recomienda establecer una comparación minuciosa de todos los algoritmos de entrenamiento y se debe emplear más de 100 neuronas en rangos de 10 para conocer los parámetros de validación ya que se puede obtener un mejor resultado si se entrena la RNA con más neuronas de capa oculta.
- Los datos utilizados en el entrenamiento de la RNA deben ser normalizados y se debe eliminar los valores demasiado atípicos ya que estos suelen aumentar el error de las predicciones que realiza la RNA.

BIBLIOGRAFÍA

ACOSTA, J; et al. Vapor - Liquid Equilibrium of the Ternary System Ethyl Acetate + Hexane + Acetone at 101 . 32 kPa. *Journal of Chemical and Engineering Data*, vol. 47, 2002, pp. 849-854. DOI 10.1021/je0102917.

ADESINA, A.Y; et al. *Corrosion challenges and prevention in Ethyl Acetate (EA) production and related processes – An overview*, 2021, S.l.: Elsevier Ltd.

AN, Y ; et al. Design/optimization of energy-saving extractive distillation process by combining preconcentration column and extractive distillation column. *Chemical Engineering Science*, vol. 135, 2015, pp. 166-178. ISSN 00092509. DOI 10.1016/j.ces.2015.05.003.

AYUSO, M; et al. Experimental screening of ionic liquids as mass agents in the n-hexane/1-hexene extractive distillation. *Fluid Phase Equilibria*, vol. 549, 2021 . ISSN 03783812. DOI 10.1016/j.fluid.2021.113205.

CHEN, Y ; et al. Design and control of an energy intensified side-stream extractive distillation for binary azeotropic separation of n-hexane and ethyl acetate. *Separation and Purification Technology*, vol. 294, 2022, pp. 121176. ISSN 13835866. DOI 10.1016/j.seppur.2022.121176.

CHUQUIN, D; et al. Prediction of methanol production in a carbon dioxide hydrogenation plant using neural networks. *Energies*, vol. 14, no. 13 (2021), pp. 1-18. ISSN 19961073. DOI 10.3390/en14133965.

CLOUGH, S. Hexane. *Encyclopedia of Toxicology*. S.l.: Elsevier, 2014, pp. 900-904.

CLOUGH, S; & MULHOLLAND, L. Hexane. *Encyclopedia of Toxicology*. S.l.: Elsevier, 2005, pp. 522-525.

CORTES, D; & ORMAZA, R. SCILAB. [en línea]. 2006. pp. 2-57. Disponible en: http://www.fce.unal.edu.co/media/files/UIFCE/Software_Libre_y_Propietario/Scilab.pdf.

FELLOWS, P. Evaporation and distillation. *Food Processing Technology*. S.l.: Elsevier, 2022, pp. 389-413.

FENG, Z; et al. Design and control of vapor recompression assisted extractive distillation for separating n-hexane and ethyl acetate. *Separation and Purification Technology*, vol. 240, 2020, ISSN 18733794. DOI 10.1016/j.seppur.2020.116655.

FLORES, I. Aplicación del programa matlab en la resolución de ecuaciones diferenciales aplicado a la materia de cálculo III. (Trabajo de titulación)(Primer Nivel). Universidad Católica de Santiago de Guayaquil, Guayaquil-Ecuador. 2012. pp. 20-23.

GERBAUD, V; et al. Review of extractive distillation. Process design, operation, optimization and control. 1 enero 2019. S.l.: Institution of Chemical Engineers.

GIL, I; et al. Extractive Distillation of Acetone/Methanol Mixture Using Water as Entrainer. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 48, no. 10 (2009), pp. 4858-4865. ISSN 0888-5885. DOI 10.1021/ie801637h.

GU, J; et al. Improved design and optimization for separating tetrahydrofuran–water azeotrope through extractive distillation with and without heat integration by varying pressure. *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 133, 2018, pp. 303-313. ISSN 02638762. DOI 10.1016/j.cherd.2018.03.015.

HU, Y; et al. Systematic approach for screening organic and ionic liquid solvents in homogeneous extractive distillation exemplified by the tert-butanol dehydration. *Separation and Purification Technology*, vol. 211, 2019, pp. 723-737. ISSN 18733794. DOI 10.1016/j.seppur.2018.10.030.

IQBAL, A; et al. Design and control of an energy-efficient alternative process for separation of Dichloromethane-Methanol binary azeotropic mixture. *Separation and Purification Technology*, vol. 219, 2019, pp. 137-149. ISSN 18733794. DOI 10.1016/j.seppur.2019.03.005.

KISS, A; et al. Energy Efficient Bioethanol Purification by Heat Pump Assisted Extractive Distillation. *Computer Aided Chemical Engineering*. S.l.: Elsevier B.V., 2015, pp. 1307-1312.

LEE, F; & WYTCHERLEY, R. Distillation: Azeotropic Distillation. *Encyclopedia of Separation Science*. S.l.: Elsevier, 2000, pp. 990-995.

LEI, Z; et al. Extractive distillation. *Special Distillation Processes*. S.l.: Elsevier, 2022, pp. 65-154.

LI, H; et al. Molecular interaction mechanism in the separation of a binary azeotropic system by extractive distillation with ionic liquid. *Green Energy and Environment*, vol. 6, no. 3 (2021), pp. 329-338. ISSN 24680257. DOI 10.1016/j.gee.2020.11.025.

LI, X; et al. Investigation of energy-efficient heat pump assisted heterogeneous azeotropic distillation for separating of acetonitrile/ethyl acetate/n-hexane mixture. *Chinese Journal of*

Chemical Engineering, 2022, ISSN 10049541. DOI 10.1016/j.cjche.2022.04.015.

LI, Yudong; et al. Investigation on energy-efficient extractive distillation for the recovery of ethyl acetate and 1,4-dioxane from industrial effluent. *Journal of Cleaner Production*, vol. 329, 2021, pp. 129759. ISSN 09596526. DOI 10.1016/j.jclepro.2021.129759.

LIU, J; et al. Comparative optimal design and effective control of different pressure extractive distillation for separating acetone - Methanol. *Separation and Purification Technology*, vol. 301, 2022, pp. 121936. ISSN 13835866. DOI 10.1016/j.seppur.2022.121936.

LOY, Y; et al. Bioethanol recovery and purification using extractive dividing-wall column and pressure swing adsorption: An economic comparison after heat integration and optimization. *Separation and Purification Technology*, vol. 149, 2015, pp. 413-427. ISSN 18733794. DOI 10.1016/j.seppur.2015.06.007.

LÜ, L; et al. Comparison of continuous homogenous azeotropic and pressure-swing distillation for a minimum azeotropic system ethyl acetate/n-hexane separation. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 2018, pp. 2023-2033. ISSN 10049541. DOI 10.1016/j.cjche.2018.02.002.

MANDAGARÁN, B.A; & CAMPANELLA, E.A. Cálculo y predicción de azeótropos multicomponentes con modelos de coeficientes de actividad. *Informacion Tecnologica*, vol. 19, no. 5 (2008), pp. 73-84. ISSN 07168756. DOI 10.1612/inf.tecnol.3931it.07.

MARINO, D.J. Ethyl Acetate*. *Encyclopedia of Toxicology*. S.l.: Elsevier, 2005, pp. 277-279.

MARTÍNEZ, J; et al. *Entrenamiento de una red neuronal en LabVIEW para la identificación en línea de un sistema dinámico*. 2013. S.l.: s.n.

MATICH, D. Cátedra: Informática Aplicada a la Ingeniería de Procesos-Orientación I Redes Neuronales: Conceptos Básicos y Aplicaciones. [en línea] 2001. [Consulta: 20 agosto 2022]. Disponible en: https://www.frro.utn.edu.ar/repositorio/catedras/quimica/5_anio/orientadora1/monograis/matic-h-redesneuronales.pdf.

MEDEIROS, D. DWSIM-Process Simulation, Modeling and Optimization Technical Manual. S.l. 2016.

NOVALES, A. Análisis de Regresión. [en línea]. 2010. pp. 4-116. Disponible en: <https://www.ucm.es/data/cont/docs/518-2013-11-13-Analisis de Regresion.pdf>.

OTINIANO, M. Cálculos en destilación continua para sistemas binarios ideales utilizando hoja

de cálculo. [en línea]. 2004. pp. 217-226. [Consulta: 12 agosto 2022]. Disponible en: https://sisbib.unmsm.edu.pe/bibvirtualdata/publicaciones/rsqp/n4_2004/a06.pdf.

PATRAȘCU, I; et al. Dynamics and control of a heat pump assisted extractive dividing-wall column for bioethanol dehydration. *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 119, 2017, pp. 66-74. ISSN 02638762. DOI 10.1016/j.cherd.2016.12.021.

QI, J; et al. Comparison of heterogeneous azeotropic distillation and energy-saving extractive distillation for separating the acetonitrile-water mixtures. *Separation and Purification Technology*, vol. 238, 2020, ISSN 18733794. DOI 10.1016/j.seppur.2019.116487.

QIN, Y, et al. Multi-objective optimization and comparison of the entrainer-assisted pressure-swing distillation and extractive distillation separation sequences for separating a pressure-insensitive binary azeotrope. *Computers & Chemical Engineering*, vol. 165, 2022, pp. 107959. ISSN 00981354. DOI 10.1016/j.compchemeng.2022.107959.

RAMÍREZ, H.A.P; et al. Estudio de la separación de n-hexano-acetato de etilo por destilación extractiva. *South Florida Journal of Development*, 2022, vol. 3, no. 3, pp. 4046-4056. ISSN 2675-5459. DOI 10.46932/sfjdv3n3-076.

RAMÍREZ, M. Desarrollo de módulos de simulación de procesos en ingeniería química. 2005.

SCHULZE, N. *Desarrollo de software inteligente para la estimación de proyectos*. S.l.: s.n., 2020.

SEGOVIA, J.L. *Propuesta obtención de acetato de etilo, utilizando un solo equipo para la reacción química por destilación, a partir de ácido acético y etanol* [en línea]. 2016. S.l.: s.n. [Consulta: 5 junio 2022]. Disponible en: <https://tesis.ipn.mx/bitstream/handle/123456789/22132/25-1-16964.pdf>.

SERNA, S; et al. Evaluación tecno-económica y ambiental de la producción de acetato de etilo por vía química y biológica. 2015.

SERRANO, Ó. Comparativa de prestaciones y rendimiento entre MATLAB y LabVIEW para entornos de comunicaciones, 2019.

SHEN, Y; et al. Design and optimization of reactive dividing-wall extractive distillation process for dimethyl carbonate synthesis based on quantum chemistry and molecular dynamics calculation. *Separation and Purification Technology*, 2021, vol. 273. ISSN 18733794. DOI 10.1016/j.seppur.2021.118978.

SHI, X; et al. Performance evaluation of different extractive distillation processes for separating ethanol/tert-butanol/water mixture. *Process Safety and Environmental Protection*, 2020, vol. 137, pp. 246-260. ISSN 09575820. DOI 10.1016/j.psep.2020.02.015.

SHOELSON, B. Deep learning in MATLAB. *The MathWorks, Inc.*, pp. <https://www.mathworks.com/help/nnet/deep-learning>. 2018.

VICENTE, Y. *Aplicación del Aspen Plus en el análisis de la Integración energética en la papelería Damují* [en línea]. 2017. S.l.: s.n. Disponible en: [https://dspace.uclv.edu.cu/bitstream/handle/123456789/1195/Yenier Vicente Morales.pdf?sequence=1&isAllowed=y#:~:text=Principales ventajas%3A&text=Es utilizado en las grandes,como un simulador %22serio%22.&text=Más económico que ASPEN](https://dspace.uclv.edu.cu/bitstream/handle/123456789/1195/Yenier%20Vicente%20Morales.pdf?sequence=1&isAllowed=y#:~:text=Principales%20ventajas%3A&text=Es%20utilizado%20en%20las%20grandes,como%20un%20simulador%22serio%22.&text=Más%20económico%20que%20ASPEN) (Aproximadamente la m.

VIÑUELA, P; & GALVÁN, I. *Redes de neuronas artificiales: un enfoque práctico*. 2004, S.l.: s.n. ISBN 84-205-4025-0.

VISHWANATHA, J; et al. ANOVA studies and control factors effect analysis of cobalt based microwave clad. *Materials Today: Proceedings* [en línea], 2021, vol. 46, no. xxxx, pp. 2409-2413. ISSN 22147853. DOI 10.1016/j.matpr.2021.01.214. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2021.01.214>.

WANG, Chao; et al. Design and comparison of conventional and side-stream extractive distillation sequences for separating the methanol-toluene binary azeotrope with intermediate boiling entrainer. *Computers and Chemical Engineering*, 2020, vol. 143. ISSN 00981354. DOI 10.1016/j.compchemeng.2020.107115.

WANG, C; et al. Heat pump assisted extractive distillation sequences with intermediate-boiling entrainer. *Applied Thermal Engineering*, 2021, vol. 186. ISSN 13594311. DOI 10.1016/j.applthermaleng.2020.116511.

WANG, X; et al. Design and control of extractive dividing wall column and pressure-swing distillation for separating azeotropic mixture of acetonitrile/N-propanol. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 2016, vol. 110, pp. 172-187. ISSN 02552701. DOI 10.1016/j.cep.2016.10.009.

WANG, Y; et al. Design optimization and operating pressure effects in the separation of acetonitrile/methanol/water mixture by ternary extractive distillation. *Journal of Cleaner Production*, 2019, vol. 218, pp. 212-224. ISSN 09596526. DOI 10.1016/j.jclepro.2019.01.324.

WANG, Yinglong; et al. Insight into separation of azeotrope in wastewater to achieve cleaner production by extractive distillation and pressure-swing distillation based on phase equilibrium. *Journal of Cleaner Production*, 2020, vol. 276. ISSN 09596526. DOI 10.1016/j.jclepro.2020.124213.

XU, Y; et al. Design and optimization for the separation of tetrahydrofuran/isopropanol/water using heat pump assisted heat-integrated extractive distillation. *Separation and Purification Technology*, 2021, vol. 277. ISSN 18733794. DOI 10.1016/j.seppur.2021.119498.

YANG, A; et al. Dynamic controllability investigation of an energy-saving double side-stream ternary extractive distillation process. *Separation and Purification Technology*, 2019, vol. 225, pp. 41-53. ISSN 18733794. DOI 10.1016/j.seppur.2019.05.063.

YANG, A; et al. Energy-saving investigation for diethyl carbonate synthesis through the reactive dividing wall column combining the vapor recompression heat pump or different pressure thermally coupled technique. *Energy*, 2019, vol. 172, pp. 320-332. ISSN 03605442. DOI 10.1016/j.energy.2019.01.126.

YANG KONG, Z; et al. The evolution of process design and control for ternary azeotropic separation: Recent advances in distillation and future directions. *Separation and Purification Technology*, 2022, vol. 284, pp. 120292. ISSN 13835866. DOI 10.1016/j.seppur.2021.120292.

YANG, X.L; & y WARD, J.D. Design of a Pressure-Swing Distillation Process for the Separation of n-Hexane and Ethyl Acetate Using Simulated Annealing. *Computer Aided Chemical Engineering*. S.l.: Elsevier B.V., 2019, pp. 121-126.

ZHANG, Y; et al. Intensified hybrid reactive-extractive distillation process for the separation of water-containing ternary mixtures. *Separation and Purification Technology*, 2021, vol. 279, pp. 119712. ISSN 13835866. DOI 10.1016/j.seppur.2021.119712.

ZHU, Z; et al. Energy-saving investigation of organic material recovery from wastewater via thermal coupling extractive distillation combined with heat pump based on thermoeconomic and environmental analysis. *Process Safety and Environmental Protection*, 2021, vol. 146, pp. 441-450. ISSN 09575820. DOI 10.1016/j.psep.2020.09.014.

ZHU, Z; et al. Efficient extractive distillation design for separating binary azeotrope via thermodynamic and dynamic analyses. *Separation and Purification Technology*, 2020. vol. 238. ISSN 18733794. DOI 10.1016/j.seppur.2019.116425.



ANEXOS

ANEXO A: BASE DE DATOS EMPLEADAS EN EL ENTRENAMIENTO DE LA ARN

N	T1-F	RR-ERC	FM1-F	FM2-MU	X_HE	X_NMP1	X_AE	X_NMP2
1	50	0.87	9706	69	0.81102932	0.75763282	0.97547978	0.99991602
2	78	1.2	9518	67	0.94872966	0.68878690	0.98300880	0.99999621
3	130	1.65	8278	16	0.99604247	0.67102827	0.87247169	0.99999875
4	97	1.88	9158	17	0.99480882	0.61870669	0.76745225	0.99999937
5	107	1.1	9816	29	0.91373662	0.69649028	0.99227311	0.99999362
6	27	0.89	9935	22	0.99995506	0.48807540	0.49252808	0.99999904
7	106	1.54	8409	50	0.99543858	0.67922139	0.90761417	0.99999860
8	49	1.38	8973	83	0.99294214	0.68005526	0.95668810	0.99999799
9	22	1.55	9766	5	0.99998457	0.47603881	0.46317000	0.99999973
10	54	1.96	9022	62	0.99544641	0.61826961	0.74510751	0.99999946
11	40	1.9	9478	73	0.99429944	0.60816986	0.74696927	0.99999946
12	89	1.42	8511	45	0.99444988	0.69042578	0.96695745	0.99999778
13	145	1.6	8344	83	0.99592711	0.67565431	0.87665157	0.99999872
14	22	0.9	9446	54	0.99996489	0.50472037	0.49669520	0.99999896
15	118	1.5	8037	79	0.99612408	0.69895151	0.94040816	0.99999810
16	74	1.1	9023	94	0.89128229	0.72599103	0.97187935	0.99999076
17	107	1.8	8307	89	0.99656953	0.65732046	0.80434649	0.99999915
18	101	0.8	8959	22	0.76230081	0.78929255	0.98945675	0.97808733
19	106	1.6	8690	48	0.99506649	0.66208431	0.86902438	0.99999988
20	116	1	9240	26	0.85494930	0.73871703	0.99147314	0.99997597
21	75	1.5	9922	69	0.99103724	0.63229060	0.86122888	0.99999891
22	46	1.4	9960	25	0.98959165	0.64241223	0.91311371	0.99999868
23	28	1.7	9025	67	0.99998703	0.49859832	0.46175659	0.99999976
24	101	1.5	8128	9	0.99573740	0.69369182	0.95246166	0.99999795
25	140	1.44	8480	22	0.99447854	0.68833375	0.96265929	0.99999786
26	93	1.67	9715	99	0.99459477	0.62144375	0.80093108	0.99999923
27	27	1.72	9281	62	0.99998802	0.48978939	0.45905441	0.99999978
28	71	1.02	9388	92	0.86759097	0.73017631	0.97188203	0.99998591
29	61	1.67	9781	19	0.99238262	0.61713660	0.81077476	0.99999919
30	88	1.59	9032	18	0.99407122	0.65030390	0.86515130	0.99999884
31	36	1	8757	75	0.84106889	0.75779651	0.97340272	0.99996398
32	107	1.2	9808	44	0.95701790	0.67836602	0.98926519	0.99999656
33	23	1.8	8876	22	0.99998452	0.50050393	0.46239982	0.99999978
34	41	1.6	9038	59	0.99412205	0.65009971	0.85353531	0.99999892
35	43	2	8904	41	0.99570463	0.61872302	0.74174632	0.99999947
36	80	0.87	8330	15	0.77407536	0.79590771	0.99267530	0.98387270
37	87	1.38	8244	18	0.98189070	0.70545087	0.99498003	0.99999675
38	44	1.9	9299	50	0.99452741	0.61335191	0.75425443	0.99999943
39	108	0.82	9611	34	0.78709577	0.77562648	0.98640333	0.99948287

40	82	1.9	8089	61	0.99706728	0.65612367	0.78707485	0.99999924
41	32	1	9948	88	0.99996912	0.48596520	0.48180165	0.99999932
42	50	1.3	9061	78	0.97740712	0.68857265	0.98031760	0.99999720
43	68	1.1	8960	56	0.97740712	0.72743183	0.98284297	0.99998941
44	63	1.52	8205	71	0.99584829	0.68982796	0.92288294	0.99999838
45	81	0.92	9602	73	0.83011590	0.74719882	0.97548697	0.99996011
46	35	1.18	8905	69	0.92152006	0.71420610	0.98030667	0.99999405
47	59	1.48	8005	61	0.99603945	0.70227868	0.95775132	0.99999783
48	98	1.09	8044	7	0.85536821	0.76394165	0.99735866	0.99996159
49	76	0.8	8940	29	0.76180581	0.79002475	0.98610441	0.97794449
50	65	1.9	9884	43	0.99379464	0.59452951	0.74170649	0.99999950
51	107	0.9	9205	57	0.81127937	0.76679114	0.97859478	0.99988891
52	102	1.2	8686	96	0.92283117	0.71933495	0.97221643	0.99999429
53	124	1.5	8624	18	0.99460780	0.67526954	0.92366315	0.99999844
54	148	2	8047	5	0.99715728	0.64837226	0.77134801	0.99999931
55	63	1.9	8373	61	0.99659032	0.64563670	0.77798075	0.99999929
56	103	1.8	9783	88	0.99314341	0.60707828	0.76300445	0.99999940
57	20	1.3	9852	69	0.99998289	0.48041398	0.46873346	0.99999963
58	53	1.6	9820	96	0.99225022	0.62512613	0.82189977	0.99999913
59	128	2	8910	48	0.99571364	0.61871193	0.74064259	0.99999947
60	36	1.5	9175	96	0.99326044	0.65774848	0.88355352	0.99999872
61	24	1.9	8398	95	0.99998847	0.51743378	0.45994793	0.99999979
62	77	0.9	8059	50	0.77808430	0.80193374	0.97491536	0.98772336
63	89	1.3	8292	13	0.95066860	0.71545274	0.99644297	0.99999516
64	23	1.5	9267	83	0.99998652	0.49496304	0.46563905	0.99999970
65	39	1.71	8262	50	0.99634046	0.66641704	0.84333269	0.99999894
66	93	1.84	8068	46	0.99696540	0.66158388	0.80801493	0.99999913
67	35	0.96	8507	55	0.81679228	0.77705203	0.97810921	0.99987405
68	113	1.6	9742	13	0.99196043	0.62535383	0.83710366	0.99999905
69	55	1.62	9049	29	0.99421607	0.64678240	0.85070936	0.99999894
70	84	0.9	8429	16	0.78947389	0.79425419	0.99276163	0.99781417
71	22	1.5	8677	19	0.99998624	0.51305051	0.47558340	0.99999964
72	130	1.2	8905	79	0.92997399	0.71083104	0.97789964	0.99999485
73	77	1.1	8448	94	0.87320193	0.74765525	0.96865614	0.99998485
74	107	1.3	8424	34	0.95549522	0.71095700	0.99031697	0.99999577
75	50	0.8	9819	57	0.78327530	0.77531688	0.97751083	0.99948141
76	68	1.78	8768	58	0.99554681	0.64172092	0.80061573	0.99999920
77	95	1.88	9769	55	0.99342354	0.60000856	0.74745788	0.99999947
78	102	1.29	9698	24	0.98861526	0.66675943	0.98755410	0.99999760
79	87	1.62	9393	89	0.99354739	0.63673515	0.82886018	0.99999907
80	31	1.71	8308	75	0.99632440	0.66535383	0.83679502	0.99999897
81	55	0.9	8711	18	0.79770736	0.78445475	0.99236106	0.99946367
82	64	1.22	9587	67	0.95937579	0.68296718	0.98345122	0.99999670
83	109	1.18	8615	88	0.91209438	0.72545072	0.97367891	0.99999304

84	99	1.26	9734	37	0.98096876	0.67061988	0.99124539	0.99999733
85	98	0.87	9857	38	0.81463587	0.75164006	0.98673467	0.99992357
86	81	0.86	9763	86	0.81463587	0.75898586	0.96942658	0.99991228
87	69	1.43	9402	91	0.99210166	0.65862769	0.90846363	0.99999866
88	109	2	9146	80	0.99531663	0.61167628	0.73088709	0.99999951
89	81	1.4	9746	16	0.98980745	0.64912967	0.92366472	0.99999854
90	141	1.8	8921	17	0.99513586	0.63350641	0.79637098	0.99999923
91	28	1.9	8341	14	0.99998926	0.51710295	0.46518995	0.99999977
92	114	0.8	9999	52	0.78733785	0.76900633	0.98016457	0.99967295
93	60	1.21	9604	14	0.95554769	0.68276106	0.99647878	0.99999621
94	22	1.58	8500	32	0.99998230	0.51797785	0.47364805	0.99999967
95	54	0.99	8780	69	0.83754503	0.75922961	0.97527462	0.99995878
96	80	1.5	9151	85	0.99344032	0.65828741	0.88657833	0.99999870
97	116	0.84	9249	42	0.78678313	0.78245904	0.98258553	0.99927829
98	65	0.93	8886	43	0.81530790	0.77012623	0.98344316	0.99988523
99	90	1.4	8513	40	0.99425846	0.69296269	0.98010553	0.99999755
100	90	1	8765	47	0.84130739	0.75688834	0.98319709	0.99996059
101	30	1.3	8532	46	0.95936816	0.70715340	0.98719345	0.99999612
102	120	1.7	8547	6	0.99561789	0.65576230	0.84400243	0.99999894
103	104	1.3	9088	40	0.97828811	0.68665960	0.98985518	0.99999707
104	55	1.4	8772	86	0.99201315	0.68457968	0.95474535	0.99999799
105	95	0.87	9456	96	0.80487952	0.76715239	0.96454775	0.99988621
106	120	1.38	8171	11	0.97906019	0.70810924	0.99688816	0.99999654
107	85	1.66	9132	79	0.99436847	0.64114302	0.82470509	0.99999909
108	60	1.93	9546	27	0.99403250	0.60238701	0.74429083	0.99999948
109	50	1.84	8973	9	0.99510254	0.62804922	0.78454029	0.99999929
110	61	0.81	9832	44	0.78792541	0.77133196	0.98292677	0.99962843
111	106	1.29	8266	73	0.94557669	0.71954758	0.97865553	0.99999542
112	110	1.66	9363	62	0.99371246	0.63291066	0.82010913	0.99999912
113	68	1.24	9850	48	0.97560409	0.67029436	0.98871239	0.99999725
114	109	0.82	9301	51	0.77953433	0.78655563	0.97850545	0.99851206
115	85	1.82	9606	88	0.99214440	0.61098738	0.76194764	0.99999940
116	31	0.94	8798	55	0.81701959	0.77104525	0.97883559	0.99989601
117	46	1.02	8662	84	0.84659565	0.75685793	0.97048206	0.99996986
118	20	1.43	9361	73	0.99994222	0.49309881	0.46796439	0.99999967
119	102	1.24	8798	41	0.94335973	0.70690255	0.98857737	0.99999534
120	100	0.97	8919	86	0.83315316	0.75932060	0.96940967	0.99995694
121	150	1.09	9138	49	0.89044716	0.72282175	0.98530072	0.99998980
122	28	1.73	9541	40	0.99997379	0.48082484	0.45763548	0.99999979
123	139	0.99	8243	18	0.82096365	0.77916172	0.99261472	0.99985344
124	62	1.86	8264	14	0.99642307	0.65169751	0.80065440	0.99999918
125	116	1.3	9361	95	0.98698843	0.67849168	0.97721511	0.99999760
126	50	0.8	9300	23	0.77094336	0.78836892	0.98937792	0.99280676
127	100	1.4	8060	79	0.98288020	0.71124609	0.97785671	0.99999705

128	43	1.9	9954	80	0.99308736	0.59341801	0.73576217	0.99999510
129	92	1.8	9457	7	0.99309013	0.61525987	0.78231414	0.99999931
130	96	0.86	8560	9	0.77664287	0.79396179	0.99596798	0.98921170
131	39	1.61	9944	46	0.98607616	0.61878117	0.82225607	0.99999914
132	86	1.08	8740	57	0.87418308	0.73986325	0.98143920	0.99998471
133	115	1.82	9776	92	0.99334953	0.60571418	0.75744981	0.99999942
134	40	1.07	8490	27	0.86208537	0.75094765	0.99056506	0.99997563
135	110	1.77	9946	89	0.99266823	0.60462068	0.76706863	0.99999939
136	139	1.42	8197	60	0.99269411	0.70270218	0.98173350	0.99999742
137	104	1.13	9928	48	0.92979487	0.68727720	0.98782634	0.99999522
138	93	1.44	8631	23	0.99420531	0.68276181	0.95406095	0.99999802
139	73	0.93	9976	22	0.84364992	0.73029341	0.99307755	0.99997227
140	108	1.52	9010	74	0.99392332	0.66050934	0.88534564	0.99999870
141	23	1.64	8049	97	0.99998660	0.53521477	0.47278458	0.99999967
142	136	1.07	8577	31	0.86486859	0.74766556	0.98937131	0.99997829
143	50	1.17	8077	43	0.88930487	0.74725177	0.98536529	0.99998669
144	36	1.13	9131	16	0.90727884	0.71419602	0.99534329	0.99999185
145	101	1.29	8277	90	0.94598286	0.71952118	0.97386635	0.99999559
146	89	1.58	9095	83	0.99410173	0.65094933	0.85508549	0.99999891
147	138	1.4	8718	89	0.99389657	0.68661876	0.95687326	0.99999795
148	46	1.56	8567	75	0.99525563	0.67171124	0.88594587	0.99999867
149	108	1.05	9292	27	0.87779230	0.72533148	0.99172810	0.99998644
150	107	0.84	9912	52	0.80284036	0.75915043	0.98122026	0.99987503
151	57	1.1	8358	69	0.87021893	0.75061807	0.97637452	0.99998210
152	67	1.14	9459	55	0.92117435	0.70154088	0.98513825	0.99999432
153	26	0.9	8054	38	0.99996603	0.55634857	0.52256326	0.99999835
154	66	1.5	9176	31	0.99318404	0.65600531	0.89588609	0.99999864
155	42	1.3	8903	93	0.97217550	0.69461169	0.97600852	0.99999705
156	108	1.2	9891	19	0.95932585	0.67495833	0.99538954	0.99999654
157	49	1.3	8506	58	0.95844195	0.70842384	0.98382882	0.99999615
158	22	0.81	9042	57	0.99995168	0.52261976	0.51015901	0.99999844
159	42	1.13	9427	9	0.91595511	0.70347115	0.99750663	0.99999312
160	45	0.89	8652	45	0.79182572	0.78996022	0.98053254	0.99915618
161	109	0.85	9336	92	0.79326948	0.77744063	0.96396301	0.99973780
162	89	1.25	8009	66	0.91952783	0.73611016	0.97899533	0.99999283
163	62	1.82	8184	86	0.99681868	0.66002426	0.80291942	0.99999915
164	135	0.92	8403	89	0.79699787	0.79236219	0.96193496	0.99952760
165	91	1.69	8742	49	0.99478018	0.65089916	0.83255596	0.99999903
166	135	1.92	8998	42	0.99534856	0.62159860	0.75803964	0.99999941
167	42	1.77	8215	48	0.99657553	0.66239305	0.82461489	0.99999905
168	71	1.59	8388	63	0.99573934	0.67461257	0.88312170	0.99999868
169	50	0.9	9081	63	0.80796941	0.77151866	0.97578496	0.99986117
170	24	1	9853	95	0.99977911	0.48916244	0.48252541	0.99999930
171	117	1.9	9373	21	0.99436179	0.61012482	0.75634438	0.99999943

172	22	1.2	8391	53	0.99998075	0.53230676	0.49253670	0.99999933
173	98	1.7	8421	88	0.99611481	0.66250850	0.83368935	0.99999900
174	112	2	9636	16	0.99393384	0.59406831	0.72822026	0.99999954
175	30	1.2	8818	3	0.99997833	0.51520534	0.48937929	0.99999937
176	75	1.69	9697	21	0.99275111	0.61793388	0.80645485	0.99999921
177	103	1.43	9200	61	0.99248811	0.66475780	0.92312738	0.99999849
178	108	1.87	9864	33	0.99315935	0.59722625	0.75049313	0.99999946
179	101	1.29	8458	30	0.95256229	0.71115306	0.99143549	0.99999559
180	83	0.9	8302	33	0.78564206	0.79823979	0.98464187	0.99598345
181	54	1.18	9689	58	0.94499078	0.68627128	0.98541112	0.99999605
182	34	1.81	8422	76	0.99635583	0.65188047	0.79966349	0.99999918
183	22	0.82	8451	21	0.99995454	0.54350977	0.47407392	0.99999811
184	113	1.99	8459	22	0.99649016	0.63447533	0.75859661	0.99999939
185	96	1.19	9477	41	0.94322232	0.69132175	0.98938064	0.99999573
186	97	1.8	9233	4	0.99434927	0.62256296	0.78904218	0.99999926
187	109	1.3	8336	51	0.95228909	0.71473392	0.98530423	0.99999567
188	35	1.53	9769	12	0.99151202	0.63216689	0.86352516	0.99999889
189	30	0.8	9167	57	0.99994842	0.51854735	0.50889988	0.99999845
190	50	1.92	9692	58	0.99375424	0.59939371	0.73942231	0.99999950
191	132	1.69	8867	61	0.99999950	0.64681642	0.82611814	0.99999907
192	64	1.78	9178	85	0.99505587	0.62838312	0.78433060	0.99999929
193	108	0.99	9673	19	0.86222286	0.72550328	0.99415750	0.99998168
194	40	1.87	9909	62	0.99282972	0.59664932	0.74589114	0.99999948
195	52	1.19	9625	17	0.94750329	0.68562828	0.99567332	0.99999584
196	43	0.84	8596	45	0.76930835	0.79576771	0.97836398	0.98451153
197	46	1.25	9735	16	0.97666072	0.67166208	0.99616480	0.99999709
198	29	1.02	9681	9	0.87543030	0.71790726	0.99732895	0.99998602
199	106	1.32	8651	98	0.97193676	0.70087742	0.97402568	0.99999698
200	47	1.75	8009	76	0.99694935	0.67278237	0.83416874	0.99999897
201	71	1.28	9523	75	0.98336912	0.67553818	0.98212379	0.99999748
202	33	1.95	9192	94	0.99515749	0.61423309	0.73911771	0.99999948
203	34	0.97	8012	89	0.80519816	0.79490113	0.96138318	0.99964415
204	26	1.68	8722	61	0.99998847	0.50901906	0.46575571	0.99999973
205	32	0.84	9399	95	0.99995762	0.50983444	0.49952698	0.99999876
206	95	1.99	9400	63	0.99466654	0.60362579	0.72962478	0.99999952
207	38	1.74	9292	81	0.99429274	0.62809211	0.79356477	0.99999925
208	79	1.57	8247	76	0.99598957	0.68248183	0.89572826	0.99999857
209	55	1.31	9935	14	0.98806521	0.65562680	0.96560140	0.99999799
210	110	1.32	9325	19	0.99062319	0.67475955	0.98936493	0.99999751
211	28	1.07	9639	58	0.99997338	0.49280138	0.48294557	0.99999937
212	65	0.99	9723	92	0.86350925	0.72546031	0.97252528	0.99998553
213	24	1.63	9092	22	0.99998746	0.49635594	0.46587841	0.99999973
214	97	1.89	8812	30	0.99564076	0.63003072	0.77248279	0.99999934
215	116	1.73	9152	95	0.99464849	0.63409215	0.79852307	0.99999922

216	135	1.48	8560	84	0.99487883	0.68177974	0.92243062	0.99999842
217	69	1.07	8339	49	0.85716111	0.75734482	0.98245599	0.99997262
218	89	0.92	8439	25	0.79808563	0.78952956	0.98910295	0.99932292
219	92	1.65	9303	79	0.99316854	0.63638031	0.82272048	0.99999910
220	27	1.3	9200	100	0.99998305	0.50218663	0.47382995	0.99999957
221	53	1.5	8593	95	0.99495509	0.67836988	0.90850455	0.99999858
222	103	1.2	8405	30	0.91329482	0.72847874	0.99067439	0.99999194
223	57	1.9	8570	36	0.99615409	0.63788261	0.77597311	0.99999931
224	119	1.81	8970	45	0.99456433	0.63170821	0.78763413	0.99999927
225	45	1.18	8927	100	0.92221778	0.71413676	0.97181325	0.99999447
226	45	1.73	9400	54	0.99387192	0.62470845	0.79757542	0.99999924
227	114	1.47	9919	98	0.99094517	0.63676785	0.86925526	0.99999886
228	55	2	8778	34	0.99593778	0.62284893	0.74588253	0.99999945
229	134	1.45	8748	17	0.99394988	0.67702974	0.94373549	0.99999819
230	27	1.1	9181	74	0.99997567	0.50759601	0.48601928	0.99999934
231	56	1.36	9467	33	0.99084568	0.66441562	0.95473342	0.99999812
232	55	1.73	9006	40	0.99480001	0.63758021	0.81166306	0.99999916
233	124	1.17	8190	95	0.89334968	0.74390174	0.96893883	0.99998961
234	94	1.13	8623	61	0.89143503	0.73409567	0.98074141	0.99998927
235	77	1.48	8280	19	0.99531300	0.69062408	0.95221273	0.99999800
236	36	0.89	9618	83	0.81754157	0.75521423	0.97112228	0.99993839
237	67	1.35	8256	60	0.96997111	0.71037650	0.98312802	0.99999655
238	115	1.43	9236	24	0.99238814	0.66254806	0.92907861	0.99999844
239	76	1.34	9511	84	0.99065837	0.66711891	0.95345404	0.99999811
240	60	1.05	8436	27	0.85202581	0.75749598	0.99022837	0.99996646
241	80	1.83	8192	29	0.99665960	0.65735217	0.80963503	0.99999913
242	47	1.72	8021	44	0.99679057	0.67439774	0.85080272	0.99999888
243	108	1.92	9046	6	0.99512480	0.61898239	0.76187564	0.99999939
244	28	1.32	9531	88	0.99998328	0.49054817	0.47006544	0.99999962
245	94	1.72	9692	10	0.99285350	0.61494661	0.79881655	0.99999924
246	70	0.93	8305	16	0.79813980	0.79179954	0.99288345	0.99911805
247	48	0.81	9169	42	0.77194124	0.79092016	0.98134689	0.99378217
248	150	1.61	8969	42	0.99304207	0.65096921	0.85522497	0.99999890
249	107	1.99	8577	29	0.99629318	0.63046888	0.75425169	0.99999941
250	118	1.82	8928	89	0.99540836	0.63347555	0.77932186	0.99999930
251	95	1.79	9368	6	0.99398742	0.61901873	0.78776484	0.99999928
252	80	0.89	9630	90	0.81783801	0.75499605	0.96877168	0.99999808
253	114	1.16	9574	86	0.93308085	0.69454801	0.97776281	0.99999553
254	104	1.21	9113	72	0.94079259	0.70137065	0.98068456	0.99999563
255	111	1.96	8585	6	0.99616016	0.63181979	0.76472640	0.99999936
256	38	1.29	8363	34	0.94913314	0.71488088	0.99013160	0.99999535
257	33	0.94	9935	52	0.99996242	0.48724569	0.48756406	0.99999918
258	70	1.88	8215	3	0.99668937	0.65153746	0.79841527	0.99999917
259	96	0.94	9623	92	0.83929618	0.74153116	0.97023921	0.99997226

260	29	1.39	8841	43	0.99998427	0.51055704	0.47703584	0.99999959
261	122	0.93	8827	78	0.81363576	0.77310324	0.96998146	0.99989067
262	143	0.94	9050	10	0.82412416	0.76055828	0.99629730	0.99991915
263	102	1.44	9207	50	0.99261152	0.66292827	0.91991897	0.99999854
264	99	1.55	8032	26	0.99620363	0.69178463	0.92759675	0.99999832
265	30	1.5	8874	97	0.99998454	0.50848532	0.46889199	0.99999967
266	114	1.51	8884	62	0.99417405	0.66582584	0.89755739	0.99999860
267	149	1.69	8476	91	0.99598421	0.66156781	0.83467963	0.99999899
268	103	1.68	8458	81	0.99598464	0.66296661	0.84081964	0.99999896
269	73	1.8	9886	79	0.99293544	0.60360838	0.76177312	0.99999941
270	147	1.42	8488	49	0.99452331	0.69138412	0.96728703	0.99999777
271	34	1.3	9124	59	0.97945750	0.68586104	0.98519203	0.99999720
272	124	1.9	8008	41	0.99714974	0.65865236	0.79329972	0.99999921
273	34	1.95	8247	82	0.99715210	0.64682292	0.76535319	0.99999934
274	118	1.47	8500	37	0.99480156	0.68407484	0.94132558	0.99999819
275	147	1.37	8114	38	0.99480036	0.71243049	0.98911313	0.99999646
276	70	1.41	8769	63	0.99374147	0.68274421	0.95445099	0.99999801
277	23	1.22	9746	30	0.99997908	0.48447968	0.47540622	0.99999955
278	52	1.77	8901	26	0.99512444	0.63712502	0.80464434	0.99999919
279	37	1.74	8888	10	0.99512405	0.63991017	0.81721122	0.99999912
280	97	1.16	8652	10	0.90494225	0.72598419	0.99691116	0.99999055
281	45	1.69	9755	38	0.99265084	0.61655034	0.80232153	0.99999923
282	92	1.56	9555	4	0.99236233	0.63554650	0.86027274	0.99999888
283	135	1.49	8361	17	0.99518573	0.68624756	0.94275243	0.99999815
284	105	1.47	8808	87	0.99420219	0.67410143	0.91514051	0.99999853
285	20	1.08	9230	100	0.99997537	0.50729516	0.48507511	0.99999933
286	34	1.94	9096	99	0.99536609	0.61832040	0.74297757	0.99999946
287	141	2	8101	80	0.99723322	0.64835372	0.75758650	0.99999937
288	27	1.99	9636	82	0.99998994	0.47533770	0.44800440	0.99999985
289	93	1.39	8751	70	0.99363642	0.68632300	0.96543489	0.99999783
290	87	1.54	9212	38	0.99338067	0.65024324	0.87532777	0.99999879
291	103	1.08	8955	83	0.88075953	0.73241413	0.97425385	0.99998819
292	108	1.85	9988	80	0.99282073	0.59633117	0.74678327	0.99999947
293	88	1.31	8692	21	0.96917920	0.69900649	0.99432388	0.99999646
294	39	1.88	8883	45	0.99551111	0.62880052	0.77087864	0.99999935
295	23	1.6	9623	85	0.99993778	0.48183491	0.45879236	0.99999976
296	32	1.9	9679	43	0.99999004	0.47414177	0.45173489	0.99999983
297	127	1.8	8028	77	0.99698700	0.66745061	0.81643353	0.99999908
298	27	2	9046	54	0.99998954	0.49275626	0.45356504	0.99999983
299	68	1.2	8467	18	0.91543607	0.72581046	0.99445500	0.99999208
300	110	1.3	9442	20	0.98936897	0.67378873	0.99495199	0.99999741

Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

ANEXO B: CÓDIGO PARA EL DISEÑO DE LA ARN EN MATLAB

```
1 %DISEÑO ARN PARA PREDICCIÓN DE FRACCIONES EN EL PROCESO DE
2 %"DESTILACION EXTRACTIVA ASISTIDA POR RECOMPRESION DE VAPOR"
3 clc
4 clear
5 %Leer Tabla Desde la Hoja de trabajo en Excel
6 Extraer=readtable('datos.xlsx','Sheet','DatosARN');
7
8 %Convertir la tabla de datos a Matriz Numérica
9 Datos = table2array(Extraer);
10
11 %-----PARAMETROS-----
12 %DATOS NO NORMALIZADOS (MEJOR AJUSTE)
13
14 %Parámetro de Entrada
15 %ENTRADAS: T1-1, FM-1,FM-2,RR
16 entradas=Datos(1:4,:);
17 ent=[entradas]';
18
19 %Parámetro de Salida
20 %SALIDAS: X_HE;X_NMP1;XAE;X_NMP2
21 salidas=Datos(5:8,:);
22 sal=[salidas]';
23
24 %*****RED NEURONAL*****
25 % Solve an Input-Output Fitting problem with a Neural Network
26 % Script generated by Neural Fitting app
27 % Created 09-Jan-2023 23:01:48
28 %
29 % This script assumes these variables are defined:
30 %
31 %   ent - input data.
32 %   sal - target data.
33
34 x = ent';
35 t = sal';
36
37 % Choose a Training Function
38 % For a list of all training functions type: help ntrain
39 % 'trainlm' is usually fastest.
40 % 'trainbr' takes longer but may be better for challenging problems.
41 % 'trainscg' uses less memory. Suitable in low memory situations.
42
43 %/////////////////////////////////ALGORITMO DE ENTRENAMIENTO/////////////////////////////////
44 trainFcn = 'trainbr'; % Bayesian Regularization backpropagation.
45
46
47 % Create a Fitting Network
48 %/////////////////////////////////NUMERO DE NEURONAS EN CAPA OCULTA/////////////////////////////////
49 hiddenLayerSize = 80;
50 net = fitnet(hiddenLayerSize,trainFcn);
51
52 % Choose Input and Output Pre/Post-Processing Functions
53 % For a list of all processing functions type: help nnprocess
54 net.input.processFcns = {'removeconstantrows','mapminmax'};
55 net.output.processFcns = {'removeconstantrows','mapminmax'};
56
57 % Setup Division of Data for Training, Validation, Testing
58 % For a list of all data division functions type: help nndivision
59 net.divideFcn = 'dividerand'; % Divide data randomly
60 net.divideMode = 'sample'; % Divide up every sample
61 net.divideParam.trainRatio = 70/100;
62 net.divideParam.valRatio = 15/100;
63 net.divideParam.testRatio = 15/100;
64
65 % Choose a Performance Function
66 % For a list of all performance functions type: help nnperformance
```

```

67 net.performFcn = 'mse'; % Mean Squared Error
68
69 % Choose Plot Functions
70 % For a list of all plot functions type: help nnplot
71 net.plotFcns = {'plotperform','plottrainstate','ploterrhist', ...
72 'plotregression', 'plotfit'};
73
74 % Train the Network
75 [net,tr] = train(net,x,t);
76
77 % Test the Network
78 y = net(x);
79 e = gsubtract(t,y);
80 performance = perform(net,t,y)
81
82 % Recalculate Training, Validation and Test Performance
83 trainTargets = t .* tr.trainMask{1};
84 valTargets = t .* tr.valMask{1};
85 testTargets = t .* tr.testMask{1};
86 trainPerformance = perform(net,trainTargets,y)
87 valPerformance = perform(net,valTargets,y)
88 testPerformance = perform(net,testTargets,y)
89
90 % View the Network
91 view(net)
92
93 % Plots
94 % Uncomment these lines to enable various plots.
95 %figure, plotperform(tr)
96 %figure, plottrainstate(tr)
97 %figure, ploterrhist(e)
98 %figure, plotregression(t,y)
99 %figure, plotfit(net,x,t)
100
101 % Deployment
102 % Change the (false) values to (true) to enable the following code blocks.
103 % See the help for each generation function for more information.
104 if (false)
105     % Generate MATLAB function for neural network for application
106     % deployment in MATLAB scripts or with MATLAB Compiler and Builder
107     % tools, or simply to examine the calculations your trained neural
108     % network performs.
109     genFunction(net,'myNeuralNetworkFunction');
110     y = myNeuralNetworkFunction(x);
111 end
112 if (false)
113     % Generate a matrix-only MATLAB function for neural network code
114     % generation with MATLAB Coder tools.
115     genFunction(net,'myNeuralNetworkFunction','MatrixOnly','yes');
116     y = myNeuralNetworkFunction(x);
117 end
118 if (false)
119     % Generate a Simulink diagram for simulation or deployment with.
120     % Simulink Coder tools.
121     gensim(net);
122 end
123
124
125 %-----RESULTADOS-----
126 %VALORES REALES
127 Prop_Reales= sal';
128 Val_real=[Prop_Reales]';
129
130 %VALORES PREDICHOS POR ARN
131 PropPred = net(ent(1:end,:));
132 Val_Pred=[PropPred]';

```

ANEXO C: CÓDIGO PARA LA VALIDACIÓN DE LA ARN EN MATLAB

```
1 %VALIDACION ARN PARA PREDICION DE FRACCIONES EN EL PROCESO DE
2 %"DESTILACION EXTRACTIVA ASISTIDA POR RECOMPRESION DE VAPOR"
3 clc
4 clear
5 %Leer Tabla Desde la Hoja de trabajo en Excel
6 Extraer=readtable('datos.xlsx','Sheet','ARN_Val');
7
8 %Convertir la tabla de datos a Matriz Numérica
9 DatosVal = table2array(Extraer);
10
11 %Cargar el archivo de ARN generado
12
13 load('ARN_ENTRENADA.mat');
14
15 %-----PARAMETROS-----
16 %DATOS NO NORMALIZADOS (MEJOR AJUSTE)
17
18 %Parámetro de Entrada
19 %ENTRADAS: T1-1,FM-1,FM-2,RR
20 entradas=DatosVal(1:4,:);
21 ent=[entradas]';
22
23 %*****VALIDACION RED NEURONAL*****
24
25 Propiedades_Pred=net(entradas)
26 Validacion_Pred=[Propiedades_Pred]';
```

ANEXO D: CÓDIGO PARA EL ANÁLISIS GRÁFICO

```
1
2 %////////ANALISIS GRAFICO MEDIANTE DATOS EN EXCEL////////
3 %//////////PARA DATOS DE ENTRENAMIENTO DE LA ARN//////////
4
5 clc
6 clear
7 %FRACCION MOLAR DE N-HEXANO al tope de EDC
8 data=xlsread('GRAFICAS.xlsx')
9 x=data(:,1);
10 x2=data(:,2);
11 x3=data(:,3);
12
13 figure(1)
14 plot(x,x2,'d')
15 hold on
16 plot(x,x3);grid;legend('Datos Reales','Datos Predichos')
17
18 title('Destilado de la columna EDC','FontSize',18,'FontName','Times New Roman');
19 xlabel('Experimentos','FontSize',12,'FontName','Times New Roman');
20 ylabel('Fracción molar de N-hexano','FontSize',12,'FontName','Times New Roman');
21
22 grid on;
23
24 %FRACCION MOLAR DE NMP Al fondo de EDC
25 x4=data(:,4);
26 x5=data(:,5);
27
28 figure(2)
29 plot(x,x4,'d')
30 hold on
31 plot(x,x5);grid;legend('Datos Reales','Datos Predichos')
32
33 title('Producto de fondo de la columna EDC','FontSize',18,'FontName','Times New Roman');
34 xlabel('Experimentos','FontSize',12,'FontName','Times New Roman');
35 ylabel('Fracción molar de NMP','FontSize',12,'FontName','Times New Roman');
36
37
38 %FRACCION MOLAR DE ACETATO DE ETILO al tope de ERC
39 x6=data(:,6);
40 x7=data(:,7);
41
42 figure(3)
43 plot(x,x6,'d')
44 hold on
45 plot(x,x7);grid;legend('Datos Reales','Datos Predichos')
46
47
48 title('Destilado de la columna ERC','FontSize',18,'FontName','Times New Roman');
49 xlabel('Experimentos','FontSize',12,'FontName','Times New Roman');
50 ylabel('Fracción molar de Acetato de Etilo','FontSize',12,'FontName','Times New Roman');
51
52 grid on;
53
54 %FRACCION MOLAR DE NMP al fondo de ERC
55 x8=data(:,8);
56 x9=data(:,9);
57
58 figure(4)
59 plot(x,x8,'d')
60 hold on
61 plot(x,x9);grid;legend('Datos Reales','Datos Predichos')
62
63
64 title('Producto de fondo de la columna ERC','FontSize',18,'FontName','Times New Roman');
65 xlabel('Experimentos','FontSize',12,'FontName','Times New Roman');
66 ylabel('Fracción molar de NMP','FontSize',12,'FontName','Times New Roman');
```

```

68 grid on;
69
70 %////////ANALISIS GRAFICO MEDIANTE DATOS GUARDADOS EN EXCEL////////
71 %//////////PARA DATOS DE VALIDACION DE LA ARN//////////
72
73 %FRACCION MOLAR DE N-HEXANO al tope de EDC
74 data=xlsread('GRAFICAS.xlsx')
75 x0=data(:,10);
76 x11=data(:,11);
77 x12=data(:,15);
78
79 figure(5)
80 plot(x0,x11,'b')
81 hold on
82 plot(x0,x12,'g');grid;legend('Datos Reales','Datos Predichos')
83
84 title('Destilado de la columna EDC','FontSize',14,'FontName','Times New Roman');
85 xlabel('Experimentos','FontSize',12,'FontName','Times New Roman');
86 ylabel('Fracción molar de N-hexano','FontSize',12,'FontName','Times New Roman');
87
88 grid on;
89
90 %FRACCION MOLAR DE NMP al fondo de EDC
91 x13=data(:,12);
92 x14=data(:,16);
93
94 figure(6)
95 plot(x0,x13,'g')
96 hold on
97 plot(x0,x14,'b');grid;legend('Datos Reales','Datos Predichos')
98
99 title('Producto de fondo de la columna EDC','FontSize',14,'FontName','Times New Roman');
100 xlabel('Experimentos','FontSize',12,'FontName','Times New Roman');
101 ylabel('Fracción molar de NMP','FontSize',12,'FontName','Times New Roman');
102
103 grid on;
104
105 %FRACCION MOLAR DE ACETATO DE ETILO al tope de ERC
106 x15=data(:,13);
107 x16=data(:,17);
108
109 figure(7)
110 plot(x0,x15,'g')
111 hold on
112 plot(x0,x16,'b');grid;legend('Datos Reales','Datos Predichos')
113
114 title('Destilado de la columna ERC','FontSize',14,'FontName','Times New Roman');
115 xlabel('Experimentos','FontSize',12,'FontName','Times New Roman');
116 ylabel('Fracción molar de Acetato de Etilo','FontSize',12,'FontName','Times New Roman');
117
118 grid on;
119
120 %FRACCION MOLAR DE NMP al fondo de ERC
121 x17=data(:,14);
122 x18=data(:,18);
123
124 figure(8)
125 plot(x0,x17,'g')
126 hold on
127 plot(x0,x18,'b');grid;legend('Datos Reales','Datos Predichos')
128
129 title('Producto de fondo de la columna ERC','FontSize',14,'FontName','Times New Roman');
130 xlabel('Experimentos','FontSize',12,'FontName','Times New Roman');
131 ylabel('Fracción molar de NMP','FontSize',12,'FontName','Times New Roman');
132
133 grid on;

```

ANEXO E: RESULTADOS DEL ERROR PORCENTUAL EN LA PREDICCIÓN

N	X_HE Real	X_HE Predicho	%Error X_HE	X_NMP1 Real	X_NMP1 Predicho	%Error NMP1	X_AE Real	X_AE Predicho	%Error X_AE	X_NMP2 Real	X_NMP2 Predicho	%Error NMP 2
1	0.8110	0.8110	0.0011	0.7576	0.7596	0.2604	0.9755	0.9746	0.0925	0.9999	1.0000	0.0111
2	0.9487	0.9483	0.0420	0.6888	0.6890	0.0311	0.9830	0.9831	0.0135	1.0000	0.9995	0.0502
3	0.9960	0.9960	0.0031	0.6710	0.6708	0.0370	0.8725	0.8725	0.0039	1.0000	1.0000	0.0009
4	0.9948	0.9946	0.0161	0.6187	0.6189	0.0285	0.7675	0.7675	0.0051	1.0000	0.9997	0.0347
5	0.9137	0.9134	0.0355	0.6965	0.6952	0.1886	0.9923	0.9929	0.0645	1.0000	0.9999	0.0073
6	1.0000	0.9999	0.0029	0.4881	0.4882	0.0274	0.4925	0.4924	0.0226	1.0000	0.9998	0.0221
7	0.9954	0.9951	0.0351	0.6792	0.6791	0.0141	0.9076	0.9076	0.0010	1.0000	1.0006	0.0595
8	0.9929	0.9799	1.3119	0.6801	0.6820	0.2890	0.9567	0.9609	0.4416	1.0000	0.9997	0.0341
9	1.0000	1.0001	0.0128	0.4760	0.4763	0.0559	0.4632	0.4631	0.0197	1.0000	0.9999	0.0050
10	0.9954	0.9955	0.0072	0.6183	0.6184	0.0254	0.7451	0.7450	0.0138	1.0000	1.0009	0.0895
11	0.9943	0.9685	2.5942	0.6082	0.6428	5.6864	0.7470	0.8224	10.1033	1.0000	0.9996	0.0444
12	0.9944	0.9952	0.0725	0.6904	0.6897	0.1019	0.9670	0.9672	0.0258	1.0000	1.0004	0.0380
13	0.9959	0.9959	0.0029	0.6757	0.6758	0.0231	0.8767	0.8766	0.0077	1.0000	1.0002	0.0247
14	1.0000	0.9999	0.0109	0.5047	0.5047	0.0039	0.4967	0.4966	0.0214	1.0000	1.0021	0.2080
15	0.9961	0.9961	0.0022	0.6990	0.6985	0.0717	0.9404	0.9404	0.0002	1.0000	0.9989	0.1121
16	0.8913	0.8915	0.0251	0.7260	0.7261	0.0146	0.9719	0.9717	0.0170	1.0000	0.9995	0.0470
17	0.9966	0.9966	0.0013	0.6573	0.6573	0.0039	0.8043	0.8044	0.0041	1.0000	0.9996	0.0424
18	0.7623	0.7623	0.0029	0.7893	0.7886	0.0896	0.9895	0.9897	0.0283	0.9781	0.9793	0.1232
19	0.9951	0.9954	0.0330	0.6621	0.6619	0.0300	0.8690	0.8690	0.0034	1.0000	1.0006	0.0589
20	0.8549	0.8550	0.0075	0.7387	0.7391	0.0488	0.9915	0.9912	0.0284	1.0000	0.9992	0.0800
21	0.9910	0.9910	0.0084	0.6323	0.6319	0.0560	0.8612	0.8614	0.0150	1.0000	1.0004	0.0420
22	0.9896	0.9893	0.0323	0.6424	0.6422	0.0328	0.9131	0.9132	0.0134	1.0000	1.0005	0.0497
23	1.0000	0.9999	0.0120	0.4986	0.4982	0.0700	0.4618	0.4617	0.0217	1.0000	0.9995	0.0534
24	0.9957	0.9954	0.0305	0.6937	0.6937	0.0052	0.9525	0.9525	0.0022	1.0000	1.0000	0.0019
25	0.9945	1.0158	2.1404	0.6883	0.6655	3.3225	0.9627	0.9725	1.0236	1.0000	0.9993	0.0716
26	0.9946	1.0301	3.5736	0.6214	0.6109	1.6925	0.8009	0.7940	0.8603	1.0000	1.0004	0.0436
27	1.0000	1.0004	0.0430	0.4898	0.4909	0.2330	0.4591	0.4590	0.0194	1.0000	0.9999	0.0138
28	0.8676	0.8680	0.0467	0.7302	0.7306	0.0575	0.9719	0.9718	0.0070	1.0000	1.0004	0.0455
29	0.9924	0.9926	0.0196	0.6171	0.6173	0.0244	0.8108	0.8106	0.0224	1.0000	0.9999	0.0119
30	0.9941	0.9936	0.0426	0.6503	0.6499	0.0680	0.8652	0.8652	0.0103	1.0000	1.0010	0.1023
31	0.8411	0.8167	2.9031	0.7578	0.7874	3.9066	0.9734	1.0411	6.9514	1.0000	1.0013	0.1301

32	0.957 0	0.957 1	0.0056	0.6784	0.6778	0.0805	0.989 3	0.989 8	0.0587	1.0000	1.0002	0.018 0
33	1.000 0	1.000 2	0.0183	0.5005	0.5010	0.0964	0.462 4	0.462 1	0.0636	1.0000	1.0001	0.008 7
34	0.994 1	0.993 8	0.0303	0.6501	0.6507	0.0958	0.853 5	0.853 1	0.0504	1.0000	0.9994	0.064 4
35	0.995 7	1.012 0	1.6386	0.6187	0.5659	8.5369	0.741 7	0.633 9	14.539 6	1.0000	0.9990	0.097 3
36	0.774 1	0.775 0	0.1139	0.7959	0.8067	1.3540	0.992 7	0.992 2	0.0492	0.9839	0.9947	1.099 0
37	0.981 9	0.982 0	0.0112	0.7055	0.7050	0.0679	0.995 0	0.995 3	0.0339	1.0000	0.9997	0.030 9
38	0.994 5	0.994 3	0.0239	0.6134	0.6121	0.1989	0.754 3	0.754 9	0.0886	1.0000	1.0001	0.009 4
39	0.787 1	0.787 7	0.0749	0.7756	0.7765	0.1084	0.986 4	0.985 9	0.0559	0.9995	0.9985	0.095 6
40	0.997 1	0.997 3	0.0246	0.6561	0.6558	0.0448	0.787 1	0.787 1	0.0045	1.0000	1.0004	0.041 5
41	1.000 0	0.954 9	4.5106	0.4860	0.5916	21.746 5	0.481 8	0.715 6	48.518 2	1.0000	0.9977	0.229 8
42	0.977 4	0.977 5	0.0093	0.6886	0.6887	0.0128	0.980 3	0.980 5	0.0171	1.0000	0.9992	0.081 7
43	0.977 4	0.976 3	0.1132	0.7274	0.7253	0.2922	0.982 8	0.983 7	0.0907	1.0000	1.0014	0.137 0
44	0.995 8	0.995 7	0.0198	0.6898	0.6886	0.1723	0.922 9	0.922 8	0.0120	1.0000	1.0003	0.025 7
45	0.830 1	0.829 9	0.0277	0.7472	0.7457	0.2066	0.975 5	0.976 1	0.0628	1.0000	1.0007	0.074 7
46	0.921 5	0.921 9	0.0366	0.7142	0.7149	0.0998	0.980 3	0.980 1	0.0187	1.0000	1.0004	0.044 4
47	0.996 0	0.996 1	0.0061	0.7023	0.7024	0.0185	0.957 8	0.958 0	0.0254	1.0000	1.0005	0.046 8
48	0.855 4	0.855 5	0.0181	0.7639	0.7639	0.0073	0.997 4	0.997 4	0.0056	1.0000	1.0007	0.076 5
49	0.761 8	0.761 7	0.0124	0.7900	0.7904	0.0480	0.986 1	0.985 9	0.0230	0.9779	0.9830	0.516 1
50	0.993 8	0.993 6	0.0162	0.5945	0.5945	0.0009	0.741 7	0.741 8	0.0139	1.0000	0.9992	0.080 4
51	0.811 3	0.811 9	0.0763	0.7668	0.7679	0.1474	0.978 6	0.977 9	0.0698	0.9999	1.0009	0.104 5
52	0.922 8	0.909 4	1.4576	0.7193	0.7200	0.0936	0.972 2	0.962 6	0.9857	1.0000	1.0005	0.051 9
53	0.994 6	1.017 7	2.3249	0.6753	0.6500	3.7441	0.923 7	0.910 3	1.4436	1.0000	0.9991	0.088 5
54	0.997 2	0.997 2	0.0031	0.6484	0.6483	0.0057	0.771 3	0.771 4	0.0028	1.0000	1.0000	0.003 9
55	0.996 6	0.996 3	0.0252	0.6456	0.6457	0.0115	0.778 0	0.778 0	0.0045	1.0000	0.9998	0.016 6
56	0.993 1	0.993 1	0.0047	0.6071	0.6067	0.0576	0.763 0	0.763 2	0.0230	1.0000	0.9996	0.037 6
57	1.000 0	0.999 9	0.0066	0.4804	0.4804	0.0048	0.468 7	0.468 7	0.0086	1.0000	0.9992	0.084 1
58	0.992 3	0.960 4	3.2089	0.6251	0.6364	1.8073	0.821 9	0.848 5	3.2370	1.0000	1.0008	0.079 4
59	0.995 7	1.003 7	0.8047	0.6187	0.6183	0.0622	0.740 6	0.745 5	0.6543	1.0000	1.0005	0.052 8
60	0.993 3	0.993 2	0.0057	0.6577	0.6581	0.0471	0.883 6	0.883 3	0.0267	1.0000	0.9998	0.020 4
61	1.000 0	1.000 1	0.0064	0.5174	0.5174	0.0132	0.459 9	0.460 0	0.0158	1.0000	0.9993	0.074 9
62	0.778 1	0.778 3	0.0218	0.8019	0.8022	0.0303	0.974 9	0.974 9	0.0002	0.9877	0.9893	0.159 6
63	0.950 7	0.951 0	0.0367	0.7155	0.7158	0.0531	0.996 4	0.996 2	0.0292	1.0000	0.9999	0.007 1
64	1.000 0	1.000 6	0.0574	0.4950	0.4952	0.0425	0.465 6	0.465 6	0.0069	1.0000	0.9997	0.033 7
65	0.996 3	0.996 9	0.0570	0.6664	0.6664	0.0046	0.843 3	0.843 4	0.0030	1.0000	0.9999	0.006 7
66	0.997 0	0.996 6	0.0404	0.6616	0.6621	0.0838	0.808 0	0.807 9	0.0186	1.0000	1.0003	0.027 1
67	0.816 8	0.816 9	0.0173	0.7771	0.7774	0.0495	0.978 1	0.978 0	0.0098	0.9999	0.9988	0.104 2

68	0.992 0	0.976 3	1.5816	0.6254	0.6397	2.2903	0.837 1	0.842 5	0.6405	1.0000	0.9994	0.055 3
69	0.994 2	0.969 2	2.5153	0.6468	0.6528	0.9246	0.850 7	0.841 7	1.0558	1.0000	0.9998	0.023 8
70	0.789 5	0.789 4	0.0155	0.7943	0.7954	0.1402	0.992 8	0.992 1	0.0656	0.9978	0.9968	0.101 6
71	1.000 0	0.999 9	0.0071	0.5131	0.5124	0.1349	0.475 6	0.475 8	0.0357	1.0000	1.0007	0.066 2
72	0.930 0	0.959 3	3.1562	0.7108	0.6703	5.7019	0.977 9	0.917 6	6.1653	1.0000	1.0003	0.027 5
73	0.873 2	0.873 5	0.0292	0.7477	0.7484	0.0944	0.968 7	0.968 4	0.0263	1.0000	0.9994	0.060 9
74	0.955 5	0.956 8	0.1383	0.7110	0.7098	0.1688	0.990 3	0.991 0	0.0738	1.0000	0.9995	0.050 7
75	0.783 3	0.783 2	0.0119	0.7753	0.7742	0.1498	0.977 5	0.978 2	0.0726	0.9995	0.9982	0.124 2
76	0.995 5	0.995 5	0.0015	0.6417	0.6416	0.0258	0.800 6	0.800 7	0.0061	1.0000	0.9994	0.061 6
77	0.993 4	0.993 3	0.0144	0.6000	0.5998	0.0343	0.747 5	0.747 5	0.0053	1.0000	1.0008	0.083 4
78	0.988 6	0.988 2	0.0376	0.6668	0.6668	0.0105	0.987 6	0.987 2	0.0368	1.0000	0.9998	0.014 8
79	0.993 5	0.991 9	0.1689	0.6367	0.6320	0.7393	0.828 9	0.820 6	0.9919	1.0000	0.9992	0.077 3
80	0.996 3	0.996 3	0.0025	0.6654	0.6654	0.0140	0.836 8	0.836 6	0.0178	1.0000	1.0000	0.002 1
81	0.797 7	0.797 8	0.0174	0.7845	0.7839	0.0726	0.992 4	0.992 6	0.0257	0.9995	0.9977	0.177 9
82	0.959 4	0.959 4	0.0061	0.6830	0.6807	0.3374	0.983 5	0.984 7	0.1266	1.0000	0.9995	0.048 1
83	0.912 1	0.912 2	0.0080	0.7255	0.7248	0.0864	0.973 7	0.973 7	0.0031	1.0000	1.0009	0.093 2
84	0.981 0	0.984 8	0.3872	0.6706	0.6723	0.2487	0.991 2	0.994 2	0.3005	1.0000	1.0001	0.008 5
85	0.814 6	0.814 0	0.0841	0.7516	0.7520	0.0461	0.986 7	0.986 8	0.0075	0.9999	1.0004	0.044 9
86	0.814 6	0.814 9	0.0315	0.7590	0.7594	0.0539	0.969 4	0.969 3	0.0149	0.9999	0.9998	0.015 0
87	0.992 1	0.991 7	0.0367	0.6586	0.6583	0.0476	0.908 5	0.908 6	0.0132	1.0000	1.0006	0.062 0
88	0.995 3	0.995 4	0.0073	0.6117	0.6120	0.0449	0.730 9	0.730 8	0.0185	1.0000	0.9996	0.043 0
89	0.989 8	0.989 6	0.0249	0.6491	0.6487	0.0702	0.923 7	0.924 0	0.0370	1.0000	0.9991	0.089 6
90	0.995 1	0.995 1	0.0052	0.6335	0.6338	0.0473	0.796 4	0.796 2	0.0175	1.0000	1.0003	0.026 1
91	1.000 0	1.000 1	0.0101	0.5171	0.5170	0.0143	0.465 2	0.465 3	0.0178	1.0000	1.0000	0.002 7
92	0.787 3	0.787 5	0.0228	0.7690	0.7691	0.0128	0.980 2	0.980 2	0.0010	0.9997	1.0002	0.051 9
93	0.955 5	0.955 5	0.0011	0.6828	0.6833	0.0827	0.996 5	0.996 2	0.0233	1.0000	0.9991	0.089 3
94	1.000 0	0.999 7	0.0295	0.5180	0.5181	0.0303	0.473 6	0.473 8	0.0215	1.0000	1.0002	0.018 7
95	0.837 5	0.837 8	0.0307	0.7592	0.7597	0.0554	0.975 3	0.975 0	0.0312	1.0000	1.0002	0.022 3
96	0.993 4	0.994 0	0.0548	0.6583	0.6586	0.0420	0.886 6	0.887 1	0.0544	1.0000	1.0003	0.026 6
97	0.786 8	0.786 8	0.0025	0.7825	0.7825	0.0002	0.982 6	0.982 8	0.0190	0.9993	0.9973	0.202 8
98	0.815 3	0.815 4	0.0057	0.7701	0.7698	0.0362	0.983 4	0.983 5	0.0009	0.9999	0.9968	0.303 7
99	0.994 3	0.993 7	0.0561	0.6930	0.6941	0.1703	0.980 1	0.979 5	0.0640	1.0000	1.0001	0.011 6
100	0.841 0	0.840 8	0.0580	0.7569	0.7569	0.0047	0.983 2	0.983 4	0.0204	1.0000	0.9993	0.067 6
101	0.959 4	0.959 6	0.0288	0.7072	0.7084	0.1757	0.987 2	0.986 5	0.0750	1.0000	0.9990	0.098 2
102	0.995 2	0.995 6	0.0063	0.6558	0.6557	0.0034	0.844 0	0.844 0	0.0024	1.0000	0.9993	0.071 5
103	0.978 3	0.977 9	0.0369	0.6867	0.6874	0.1044	0.989 9	0.989 4	0.0485	1.0000	1.0010	0.103 6

104	0.9920	0.9918	0.0203	0.6846	0.6840	0.0902	0.9547	0.9549	0.0199	1.0000	1.0000	0.0020
105	0.8049	0.8048	0.0135	0.7672	0.7671	0.0021	0.9645	0.9645	0.0067	0.9999	0.9996	0.0329
106	0.9791	0.9791	0.0061	0.7081	0.7085	0.0485	0.9969	0.9968	0.0137	1.0000	0.9998	0.0216
107	0.9944	0.9941	0.0319	0.6411	0.6405	0.1015	0.8247	0.8252	0.0550	1.0000	1.0000	0.0008
108	0.9940	1.0083	1.4358	0.6024	0.6013	0.1837	0.7443	0.7296	1.9777	1.0000	0.9993	0.0720
109	0.9951	0.9950	0.0103	0.6280	0.6277	0.0559	0.7845	0.7847	0.0198	1.0000	1.0001	0.0148
110	0.7879	0.7880	0.0125	0.7713	0.7718	0.0581	0.9829	0.9826	0.0368	0.9996	0.9996	0.0027
111	0.9456	0.9464	0.0873	0.7195	0.7191	0.0597	0.9787	0.9792	0.0553	1.0000	0.9997	0.0275
112	0.9937	0.9935	0.0164	0.6329	0.6333	0.0635	0.8201	0.8200	0.0164	1.0000	1.0002	0.0194
113	0.9756	0.9758	0.0244	0.6703	0.6713	0.1427	0.9887	0.9883	0.0437	1.0000	0.9997	0.0335
114	0.7795	0.7788	0.0966	0.7866	0.7860	0.0728	0.9785	0.9788	0.0291	0.9985	0.9971	0.1405
115	0.9921	0.9922	0.0065	0.6110	0.6116	0.1016	0.7619	0.7617	0.0379	1.0000	0.9996	0.0420
116	0.8170	0.8169	0.0200	0.7710	0.7700	0.1354	0.9788	0.9792	0.0392	0.9999	0.9998	0.0116
117	0.8466	0.8463	0.0353	0.7569	0.7564	0.0615	0.9705	0.9707	0.0242	1.0000	0.9997	0.0232
118	0.9999	0.9995	0.0443	0.4931	0.4925	0.1190	0.4680	0.4682	0.0410	1.0000	0.9990	0.0955
119	0.9434	0.9434	0.0046	0.7069	0.7065	0.0570	0.9886	0.9886	0.0051	1.0000	0.9995	0.0516
120	0.8332	0.8328	0.0408	0.7593	0.7584	0.1163	0.9694	0.9700	0.0611	1.0000	1.0006	0.0656
121	0.8904	0.8903	0.0126	0.7228	0.7228	0.0091	0.9853	0.9853	0.0020	1.0000	1.0007	0.0745
122	1.0000	0.9998	0.0194	0.4808	0.4810	0.0319	0.4576	0.4574	0.0467	1.0000	0.9997	0.0300
123	0.8210	0.8208	0.0160	0.7792	0.7790	0.0224	0.9926	0.9927	0.0095	0.9999	1.0014	0.1509
124	0.9964	0.9961	0.0350	0.6517	0.6521	0.0597	0.8007	0.8005	0.0150	1.0000	1.0001	0.0085
125	0.9870	0.9870	0.0047	0.6785	0.6788	0.0449	0.9772	0.9771	0.0084	1.0000	0.9992	0.0785
126	0.7709	0.7711	0.0159	0.7884	0.7887	0.0483	0.9894	0.9893	0.0056	0.9928	0.9917	0.1128
127	0.9829	0.9828	0.0126	0.7112	0.7123	0.1481	0.9779	0.9774	0.0422	1.0000	0.9993	0.0654
128	0.9938	0.9931	0.0002	0.5934	0.5936	0.0362	0.7358	0.7357	0.0129	1.0000	1.0001	0.0132
129	0.9931	0.9928	0.0265	0.6153	0.6154	0.0298	0.7823	0.7821	0.0311	1.0000	1.0004	0.0389
130	0.7766	0.8088	4.1368	0.7940	0.7927	0.1545	0.9960	0.9686	2.7430	0.9892	0.9909	0.1662
131	0.9861	0.9863	0.0270	0.6188	0.6194	0.0934	0.8223	0.8221	0.0245	1.0000	1.0004	0.0429
132	0.8742	0.8767	0.2901	0.7399	0.7428	0.3928	0.9814	0.9803	0.1124	1.0000	1.0001	0.0099
133	0.9933	0.9771	1.6349	0.6057	0.6058	0.0122	0.7574	0.7561	0.1819	1.0000	0.9986	0.1442
134	0.8624	0.8625	0.0535	0.7509	0.7519	0.1302	0.9906	0.9903	0.0286	1.0000	1.0008	0.0796
135	0.9927	0.9831	0.9653	0.6046	0.6130	1.3786	0.7671	0.7854	2.3887	1.0000	0.9998	0.0215
136	0.9927	0.9927	0.0032	0.7027	0.7028	0.0099	0.9817	0.9818	0.0036	1.0000	0.9992	0.0834
137	0.9298	0.9297	0.0113	0.6873	0.6878	0.0714	0.9878	0.9872	0.0613	1.0000	0.9996	0.0414
138	0.9942	0.9946	0.0434	0.6828	0.6833	0.0753	0.9541	0.9540	0.0059	1.0000	1.0000	0.0022
139	0.8436	0.8437	0.0081	0.7303	0.7298	0.0736	0.9931	0.9932	0.0159	1.0000	1.0000	0.0043

140	0.9939	0.9939	0.0072	0.6605	0.6611	0.0854	0.8853	0.8852	0.0137	1.0000	0.9996	0.0447
141	1.0000	0.9360	6.3971	0.5352	0.5949	11.1449	0.4728	0.5878	24.3263	1.0000	0.9996	0.0417
142	0.8649	0.8650	0.0193	0.7477	0.7480	0.0459	0.9894	0.9892	0.0163	1.0000	0.9996	0.0403
143	0.8893	0.9104	2.3730	0.7473	0.7402	0.9482	0.9854	0.9767	0.8769	1.0000	1.0002	0.0168
144	0.9073	0.9074	0.0158	0.7142	0.7144	0.0289	0.9953	0.9951	0.0200	1.0000	1.0005	0.0499
145	0.9460	0.9455	0.0522	0.7195	0.7184	0.1517	0.9739	0.9743	0.0408	1.0000	0.9989	0.1102
146	0.9941	0.9937	0.0399	0.6509	0.6505	0.0729	0.8551	0.8544	0.0755	1.0000	0.9999	0.0109
147	0.9939	0.9940	0.0061	0.6866	0.6867	0.0077	0.9569	0.9568	0.0029	1.0000	1.0005	0.0491
148	0.9953	0.9958	0.0562	0.6717	0.6727	0.1415	0.8859	0.8856	0.0406	1.0000	1.0006	0.0554
149	0.8778	0.8780	0.0218	0.7253	0.7241	0.1753	0.9917	0.9926	0.0930	1.0000	0.9997	0.0322
150	0.8028	0.8030	0.0148	0.7592	0.7588	0.0496	0.9812	0.9814	0.0162	0.9999	1.0010	0.1113
151	0.8702	0.8702	0.0034	0.7506	0.7509	0.0380	0.9764	0.9762	0.0170	1.0000	0.9998	0.0228
152	0.9212	0.9216	0.0449	0.7015	0.7034	0.2605	0.9851	0.9841	0.1053	1.0000	1.0000	0.0039
153	1.0000	1.0000	0.0058	0.5563	0.5563	0.0033	0.5226	0.5226	0.0056	1.0000	0.9990	0.1027
154	0.9932	0.9937	0.0529	0.6560	0.6570	0.1557	0.8959	0.8955	0.0404	1.0000	1.0002	0.0196
155	0.9722	0.9294	4.3960	0.6946	0.7165	3.1536	0.9760	1.0107	3.5558	1.0000	0.9972	0.2766
156	0.9593	0.9599	0.0618	0.6750	0.6759	0.1358	0.9954	0.9950	0.0368	1.0000	0.9994	0.0593
157	0.9584	0.9581	0.0407	0.7084	0.7070	0.2014	0.9838	0.9847	0.0866	1.0000	1.0000	0.0016
158	1.0000	1.0734	7.3473	0.5226	0.3831	26.7053	0.5102	0.2579	49.4497	1.0000	1.0025	0.2453
159	0.9160	0.9158	0.0126	0.7035	0.7034	0.0115	0.9975	0.9975	0.0032	1.0000	1.0009	0.0909
160	0.7918	0.7910	0.1086	0.7900	0.7892	0.0909	0.9805	0.9815	0.1003	0.9992	0.9940	0.5156
161	0.7931	0.7736	2.4804	0.7774	0.7635	1.7940	0.9640	0.9362	2.8760	0.9997	0.9980	0.1697
162	0.9192	0.9195	0.0003	0.7361	0.7361	0.0025	0.9790	0.9789	0.0135	1.0000	1.0003	0.0331
163	0.9963	0.9966	0.0185	0.6600	0.6597	0.0479	0.8029	0.8029	0.0045	1.0000	0.9996	0.0355
164	0.7974	0.7970	0.0041	0.7924	0.7924	0.0008	0.9619	0.9619	0.0061	0.9995	0.9985	0.1035
165	0.9948	0.9942	0.0597	0.6509	0.6505	0.0575	0.8326	0.8327	0.0220	1.0000	1.0004	0.0396
166	0.9953	0.9951	0.0268	0.6216	0.6211	0.0762	0.7580	0.7582	0.0186	1.0000	1.0004	0.0443
167	0.9967	0.9965	0.0103	0.6624	0.6628	0.0580	0.8246	0.8243	0.0374	1.0000	0.9999	0.0113
168	0.9958	0.9962	0.0430	0.6746	0.6757	0.1594	0.8831	0.8829	0.0253	1.0000	1.0001	0.0151
169	0.8080	0.8591	6.3242	0.7715	0.7642	0.9514	0.9758	0.9750	0.0783	0.9999	0.9995	0.0348
170	0.9998	0.9999	0.0128	0.4892	0.4894	0.0502	0.4825	0.4825	0.0124	1.0000	0.9995	0.0471
171	0.9941	0.9950	0.0660	0.6101	0.6020	1.3242	0.7563	0.7460	1.3677	1.0000	1.0005	0.0492
172	1.0000	0.9999	0.0115	0.5323	0.5318	0.0895	0.4925	0.4928	0.0453	1.0000	1.0014	0.1388
173	0.9961	0.9963	0.0233	0.6625	0.6626	0.0171	0.8337	0.8338	0.0087	1.0000	0.9999	0.0075
174	0.9939	0.9939	0.0010	0.5941	0.5940	0.0179	0.7282	0.7282	0.0034	1.0000	1.0002	0.0244
175	1.0000	0.9999	0.0099	0.5152	0.5153	0.0130	0.4894	0.4894	0.0025	1.0000	0.9998	0.0177

17 6	0.992 8	0.992 8	0.0024	0.6179	0.6178	0.0184	0.806 5	0.806 4	0.0022	1.0000	1.0007	0.074 0
17 7	0.992 5	0.992 7	0.0203	0.6648	0.6639	0.1264	0.923 1	0.923 5	0.0367	1.0000	1.0005	0.047 2
17 8	0.993 2	0.993 2	0.0071	0.5972	0.5974	0.0270	0.750 5	0.750 4	0.0062	1.0000	0.9999	0.012 7
17 9	0.952 6	0.950 9	0.1736	0.7112	0.7106	0.0802	0.991 4	0.992 0	0.0539	1.0000	0.9995	0.044 7
18 0	0.785 6	0.785 5	0.0231	0.7982	0.7975	0.0950	0.984 6	0.984 8	0.0194	0.9960	0.9947	0.128 8
18 1	0.945 0	0.936 4	0.9048	0.6863	0.6926	0.9207	0.985 4	0.993 6	0.8292	1.0000	1.0002	0.016 6
18 2	0.996 4	0.996 0	0.0320	0.6519	0.6517	0.0281	0.799 7	0.799 8	0.0198	1.0000	0.9998	0.023 2
18 3	1.000 0	0.999 7	0.0211	0.5435	0.5434	0.0214	0.474 1	0.474 1	0.0102	1.0000	0.9994	0.058 8
18 4	0.996 5	0.996 5	0.0034	0.6345	0.6343	0.0238	0.758 6	0.758 7	0.0082	1.0000	1.0006	0.059 9
18 5	0.943 2	0.943 8	0.0572	0.6913	0.6916	0.0437	0.989 4	0.989 3	0.0099	1.0000	1.0006	0.055 9
18 6	0.994 3	0.994 9	0.0519	0.6226	0.6225	0.0132	0.789 0	0.789 1	0.0114	1.0000	0.9996	0.042 9
18 7	0.952 3	0.952 1	0.0201	0.7147	0.7155	0.1072	0.985 3	0.985 0	0.0345	1.0000	0.9998	0.017 8
18 8	0.991 5	0.991 3	0.0204	0.6322	0.6317	0.0667	0.863 5	0.863 7	0.0161	1.0000	1.0003	0.028 9
18 9	0.999 9	1.000 1	0.0154	0.5185	0.5189	0.0695	0.508 9	0.508 9	0.0062	1.0000	0.9995	0.045 1
19 0	0.993 8	0.994 0	0.0205	0.5994	0.6007	0.2214	0.739 4	0.738 8	0.0808	1.0000	0.9997	0.034 7
19 1	1.000 0	1.000 0	0.0009	0.6468	0.6469	0.0106	0.826 1	0.826 0	0.0148	1.0000	0.9996	0.037 6
19 2	0.995 1	0.995 3	0.0215	0.6284	0.6282	0.0299	0.784 3	0.784 5	0.0220	1.0000	1.0006	0.057 3
19 3	0.862 2	0.861 8	0.0463	0.7255	0.7255	0.0005	0.994 2	0.994 1	0.0071	1.0000	1.0009	0.088 5
19 4	0.992 8	0.992 7	0.0150	0.5966	0.5952	0.2347	0.745 9	0.746 5	0.0877	1.0000	1.0004	0.044 3
19 5	0.947 5	0.947 8	0.0357	0.6856	0.6853	0.0484	0.995 7	0.995 9	0.0178	1.0000	0.9997	0.028 3
19 6	0.769 3	0.770 0	0.0938	0.7958	0.7966	0.1084	0.978 4	0.977 5	0.0863	0.9845	0.9908	0.637 4
19 7	0.976 7	0.976 4	0.0277	0.6717	0.6712	0.0693	0.996 2	0.996 4	0.0236	1.0000	1.0004	0.036 6
19 8	0.875 4	1.067 0	21.888 4	0.7179	0.4196	41.545 4	0.997 3	0.359 3	63.975 8	1.0000	1.0038	0.376 6
19 9	0.971 9	0.972 0	0.0097	0.7009	0.7016	0.0999	0.974 0	0.973 8	0.0266	1.0000	1.0005	0.054 4
20 0	0.996 9	0.997 2	0.0255	0.6728	0.6734	0.0949	0.834 2	0.834 2	0.0011	1.0000	1.0004	0.035 7
20 1	0.983 4	0.983 4	0.0005	0.6755	0.6765	0.1442	0.982 1	0.981 4	0.0785	1.0000	0.9997	0.032 2
20 2	0.995 2	0.995 2	0.0075	0.6142	0.6143	0.0177	0.739 1	0.739 1	0.0077	1.0000	1.0011	0.112 0
20 3	0.805 2	1.060 2	31.666 8	0.7949	0.5298	33.345 7	0.961 4	0.507 0	47.268 3	0.9996	0.9998	0.013 3
20 4	1.000 0	0.999 9	0.0113	0.5090	0.5083	0.1425	0.465 8	0.466 2	0.0995	1.0000	1.0012	0.115 8
20 5	1.000 0	0.999 9	0.0062	0.5098	0.5102	0.0633	0.499 5	0.499 5	0.0153	1.0000	0.9998	0.022 1
20 6	0.994 7	0.994 8	0.0104	0.6036	0.6035	0.0167	0.729 6	0.729 6	0.0008	1.0000	0.9997	0.032 6
20 7	0.994 3	0.993 7	0.0564	0.6281	0.6275	0.0930	0.793 6	0.793 8	0.0345	1.0000	1.0001	0.011 2
20 8	0.996 0	0.995 8	0.0210	0.6825	0.6826	0.0161	0.895 7	0.895 9	0.0243	1.0000	1.0006	0.055 8
20 9	0.988 1	0.988 3	0.0255	0.6556	0.6561	0.0719	0.965 6	0.965 4	0.0217	1.0000	1.0001	0.006 9
21 0	0.990 6	0.990 3	0.0348	0.6748	0.6756	0.1312	0.989 4	0.988 8	0.0540	1.0000	0.9998	0.021 7
21 1	1.000 0	1.000 0	0.0069	0.4928	0.4928	0.0065	0.482 9	0.483 1	0.0412	1.0000	1.0003	0.028 6

21 2	0.863 5	0.863 1	0.0420	0.7255	0.7255	0.0090	0.972 5	0.972 5	0.0033	1.0000	1.0003	0.032 7
21 3	1.000 0	1.000 0	0.0046	0.4964	0.4963	0.0027	0.465 9	0.466 0	0.0365	1.0000	0.9991	0.093 6
21 4	0.995 6	0.995 6	0.0071	0.6300	0.6297	0.0595	0.772 5	0.772 5	0.0064	1.0000	0.9997	0.032 5
21 5	0.994 6	0.994 6	0.0076	0.6341	0.6340	0.0176	0.798 5	0.798 5	0.0020	1.0000	0.9993	0.066 2
21 6	0.994 9	0.994 9	0.0027	0.6818	0.6817	0.0069	0.922 4	0.922 4	0.0006	1.0000	1.0012	0.122 4
21 7	0.857 2	0.856 9	0.0358	0.7573	0.7569	0.0579	0.982 5	0.982 5	0.0026	1.0000	1.0001	0.009 1
21 8	0.798 1	0.798 5	0.0572	0.7895	0.7894	0.0138	0.989 1	0.989 4	0.0264	0.9993	0.9974	0.188 0
21 9	0.993 2	0.993 4	0.0202	0.6364	0.6367	0.0501	0.822 7	0.822 8	0.0062	1.0000	0.9993	0.066 0
22 0	1.000 0	0.999 8	0.0194	0.5022	0.5019	0.0499	0.473 8	0.474 0	0.0374	1.0000	1.0001	0.010 0
22 1	0.995 0	0.994 9	0.0007	0.6784	0.6785	0.0177	0.908 5	0.908 5	0.0016	1.0000	1.0002	0.024 7
22 2	0.913 3	0.913 2	0.0108	0.7285	0.7290	0.0745	0.990 7	0.990 1	0.0562	1.0000	1.0008	0.084 6
22 3	0.996 2	0.996 3	0.0141	0.6379	0.6378	0.0191	0.776 0	0.776 0	0.0075	1.0000	1.0003	0.034 9
22 4	0.994 6	0.995 1	0.0509	0.6317	0.6323	0.0933	0.787 6	0.787 5	0.0109	1.0000	1.0001	0.005 3
22 5	0.922 2	0.904 6	1.9063	0.7141	0.6938	2.8532	0.971 8	0.919 7	5.3607	1.0000	0.9963	0.367 1
22 6	0.993 9	0.994 2	0.0333	0.6247	0.6250	0.0470	0.797 6	0.797 3	0.0382	1.0000	1.0001	0.012 3
22 7	0.990 9	0.991 0	0.0090	0.6368	0.6368	0.0018	0.869 3	0.869 3	0.0005	1.0000	1.0002	0.015 2
22 8	0.995 9	0.995 9	0.0050	0.6228	0.6230	0.0223	0.745 9	0.745 9	0.0004	1.0000	0.9992	0.080 8
22 9	0.993 9	1.043 0	4.9364	0.6770	0.6238	7.8558	0.943 7	0.893 7	5.3066	1.0000	0.9986	0.141 9
23 0	1.000 0	0.999 9	0.0034	0.5076	0.5078	0.0465	0.486 0	0.485 8	0.0467	1.0000	1.0001	0.014 8
23 1	0.990 8	0.990 5	0.0335	0.6644	0.6633	0.1703	0.954 7	0.955 3	0.0583	1.0000	0.9997	0.030 1
23 2	0.994 8	0.999 1	0.4306	0.6376	0.6266	1.7265	0.811 7	0.770 2	5.1061	1.0000	1.0003	0.029 4
23 3	0.893 3	0.893 3	0.0018	0.7439	0.7441	0.0260	0.968 9	0.969 0	0.0032	1.0000	1.0011	0.113 2
23 4	0.891 4	0.889 7	0.1955	0.7341	0.7335	0.0774	0.980 7	0.980 8	0.0103	1.0000	0.9994	0.063 9
23 5	0.995 3	1.000 6	0.5270	0.6906	0.6940	0.4955	0.952 2	0.960 7	0.8908	1.0000	1.0003	0.031 3
23 6	0.817 5	0.817 5	0.0032	0.7552	0.7538	0.1875	0.971 1	0.971 6	0.0444	0.9999	1.0001	0.020 8
23 7	0.970 0	0.970 4	0.0440	0.7104	0.6996	1.5229	0.983 1	0.968 3	1.5101	1.0000	0.9992	0.080 6
23 8	0.992 4	0.992 7	0.0294	0.6625	0.6616	0.1405	0.929 1	0.929 6	0.0525	1.0000	1.0003	0.033 4
23 9	0.990 7	0.999 8	0.9185	0.6671	0.6693	0.3230	0.953 5	0.959 1	0.5915	1.0000	1.0001	0.008 4
24 0	0.852 0	0.851 8	0.0232	0.7575	0.7573	0.0317	0.990 2	0.990 2	0.0038	1.0000	1.0021	0.211 0
24 1	0.996 7	0.997 4	0.0713	0.6574	0.6569	0.0699	0.809 6	0.809 8	0.0194	1.0000	0.9998	0.015 4
24 2	0.996 8	0.996 4	0.0417	0.6744	0.6737	0.0961	0.850 8	0.851 1	0.0300	1.0000	0.9988	0.117 0
24 3	0.995 1	1.017 5	2.2462	0.6190	0.6290	1.6113	0.761 9	0.792 3	3.9913	1.0000	0.9989	0.108 7
24 4	1.000 0	1.000 1	0.0136	0.4905	0.4907	0.0325	0.470 1	0.470 0	0.0188	1.0000	1.0008	0.078 8
24 5	0.992 9	0.992 9	0.0058	0.6149	0.6150	0.0061	0.798 8	0.799 0	0.0286	1.0000	0.9998	0.015 5
24 6	0.798 1	0.797 9	0.0268	0.7918	0.7916	0.0234	0.992 9	0.993 1	0.0233	0.9991	0.9991	0.005 3
24 7	0.771 9	0.771 9	0.0109	0.7909	0.7907	0.0290	0.981 3	0.981 4	0.0034	0.9938	0.9938	0.000 9

24 8	0.993 0	0.993 1	0.0030	0.6510	0.6509	0.0153	0.855 2	0.855 4	0.0170	1.0000	0.9990	0.100 1
24 9	0.996 3	0.996 4	0.0076	0.6305	0.6310	0.0794	0.754 3	0.754 1	0.0186	1.0000	0.9997	0.031 7
25 0	0.995 4	0.995 4	0.0011	0.6335	0.6331	0.0635	0.779 3	0.779 5	0.0288	1.0000	1.0008	0.080 7
	Promedio X_HE		0.5726	Promedio X_NMP1		0.8676	Promedio X_AE		1.3136	Promedio X_NMP2		0.069 7

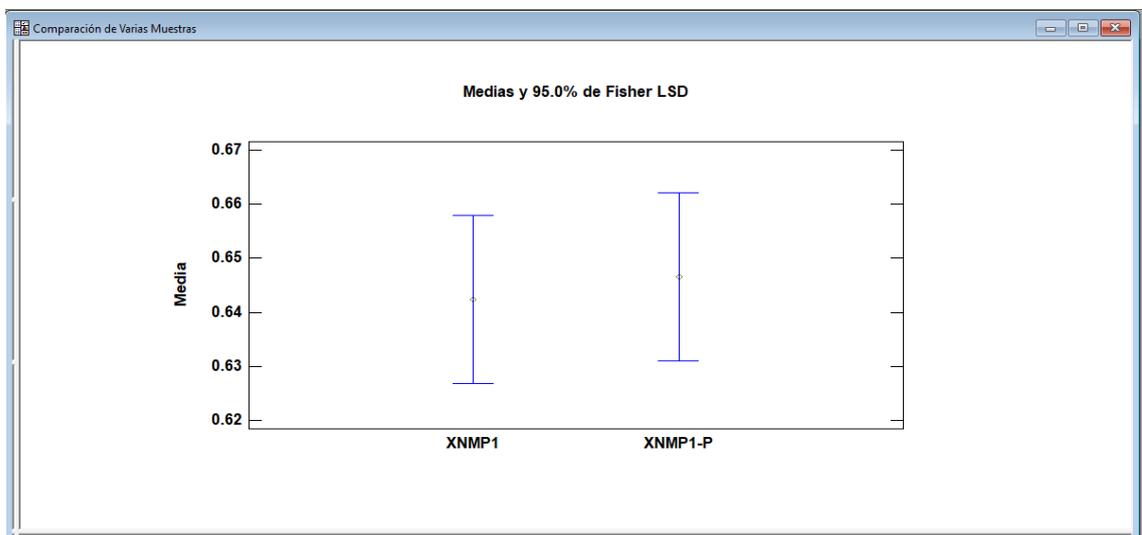
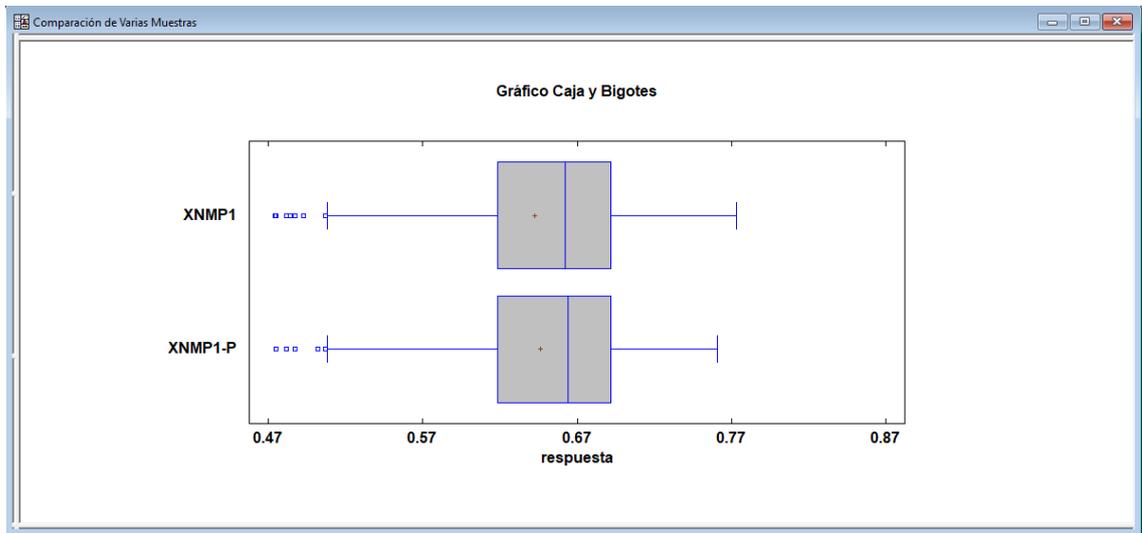
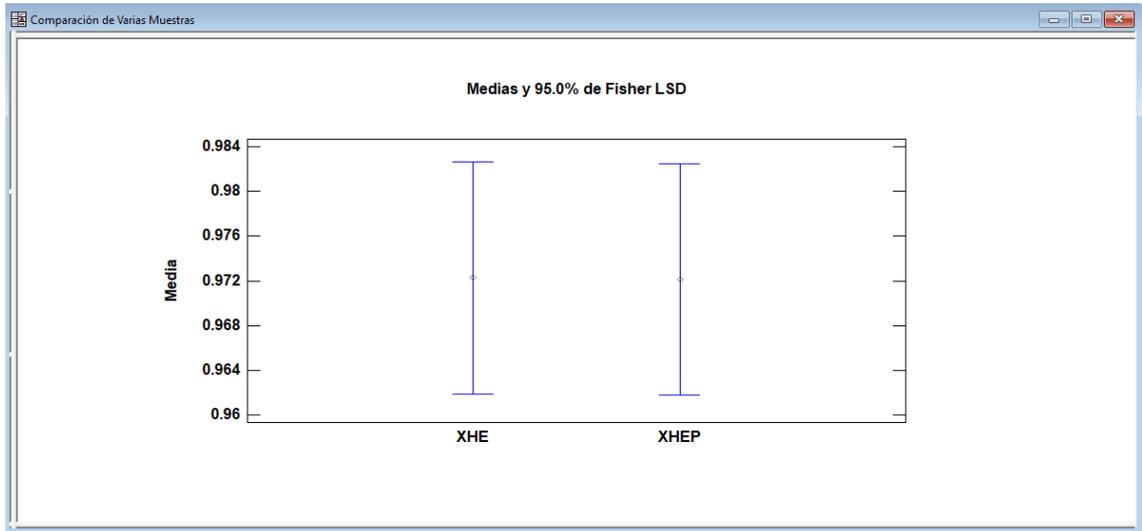
Realizado por: Chicaiza, Denisse, 2023.

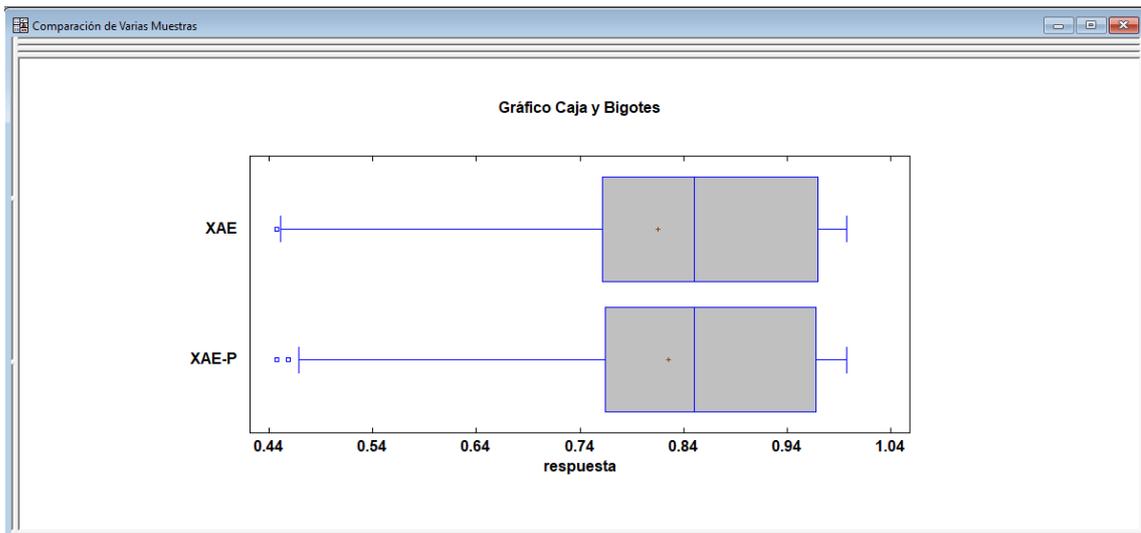
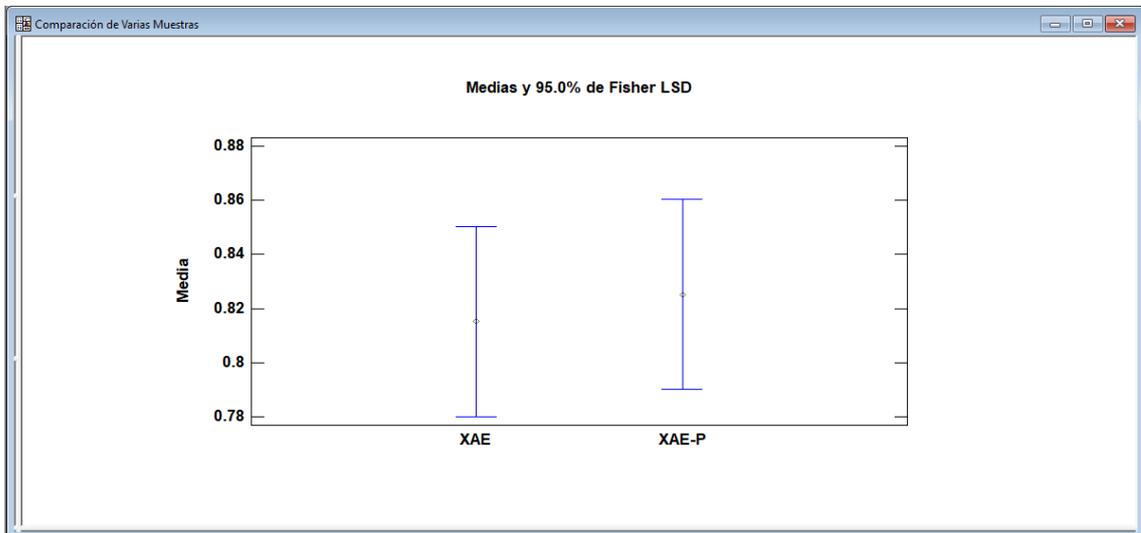
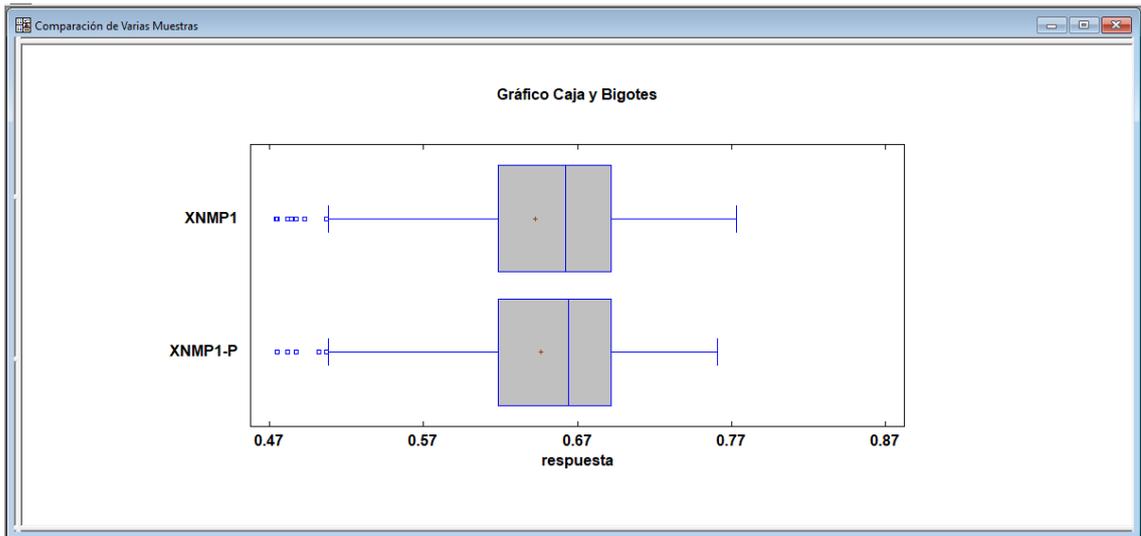
ANEXO F: RESULTADOS DEL ERROR PORCENTUAL EN LA VALIDACIÓN

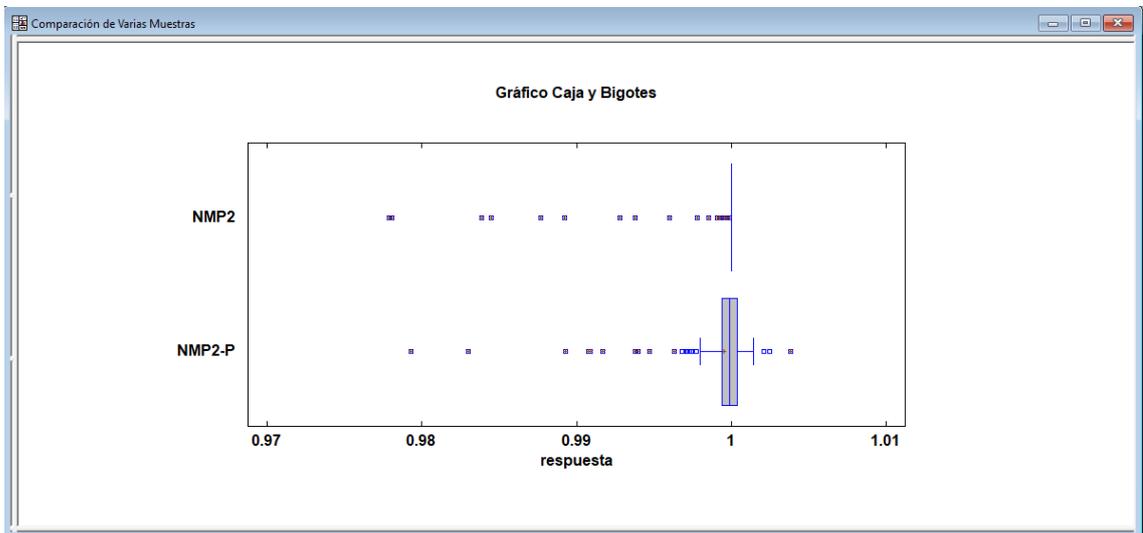
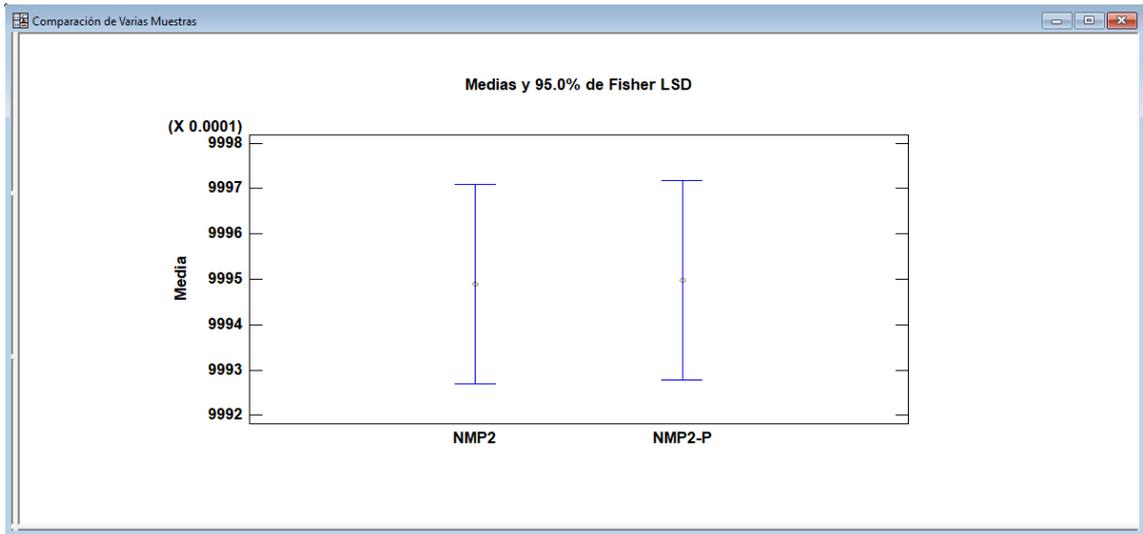
°	X_HE Real	X_HE Predicho	%Error X_HE	X_NMPI Real	X_NMPI Predicho	%Error NMP1	X_AE Real	X_AE Predicho	%Error X_AE	X_NMP2 Real	X_NMP2 Predicho	%Error NMP 2
1	0.99 398742	0.993 98739	3.0868 2E-06	0.61 901873	0.6190 18801	1.1392 3E-05	0.78 776484	0.7877 6505	2.6600 7E-05	0.99 999928	0.9999 98463	8.1748 4E-05
2	0.81 783801	0.817 83803	2.0780 5E-06	0.75 499605	0.7549 9637	4.2075 9E-05	0.96 877168	0.9687 7186	1.8639 6E-05	0.99 999808	0.9999 7907	0.0019 01456
3	0.93 308085	0.933 08079	6.1297 2E-06	0.69 454801	0.6945 4810	1.2556 8E-05	0.97 776281	0.9777 6268	1.2814 5E-05	0.99 999553	0.9999 9238	0.0003 14779
4	0.94 079259	0.940 79268	9.3209 3E-06	0.70 137065	0.7013 7077	1.7236 5E-05	0.98 068456	0.9806 8444	1.2157 9E-05	0.99 999563	0.9999 9319	0.0002 43971
5	0.99 616016	0.996 16014	1.6477 E-06	0.63 181979	0.6318 1966	2.1188 E-05	0.76 472640	0.7647 2686	5.9947 7E-05	0.99 999936	0.9999 9024	0.0009 12254
6	0.94 913314	0.949 13329	1.5501 7E-05	0.71 488088	0.7148 81058	2.4957 1E-05	0.99 013160	0.9901 31483	1.1772 3E-05	0.99 999535	0.9999 90403	0.0004 94752
7	0.99 996242	0.999 96234	7.8574 2E-06	0.48 724569	0.4872 46422	0.0001 50271	0.48 756406	0.4875 65292	0.0002 52704	0.99 999918	0.9999 71862	0.0027 3179
8	0.99 668937	0.996 68951	1.4083 1E-05	0.65 153746	0.6515 37347	1.7411 7E-05	0.79 841527	0.7984 15184	1.0770 1E-05	0.99 999917	0.9999 94505	0.0004 66512
9	0.83 929618	0.830 52084	1.0455 5957	0.74 153116	0.7453 41242	0.5138 12784	0.97 023921	0.9648 05311	0.5600 57697	0.99 997226	0.9999 7964	0.0007 38036
10	0.99 998427	0.999 98435	8.4790 9E-06	0.51 055704	0.5106	2.9186 7E-05	0.47 703584	0.4770	2.8488 7E-05	0.99 999959	1.0000	0.0002 6036
11	0.81 363576	0.798 87663	1.8139 73151	0.77 310324	0.7296	5.6256 95443	0.96 998146	0.8250	14.944 42582	0.99 989067	1.0000	0.0080 39616
12	0.82 412416	0.824 12408	9.6053 7E-06	0.76 055828	0.7606	3.2038 4E-06	0.99 629730	0.9963	1.2923 8E-05	0.99 991915	1.0000	0.0044 61784
13	0.99 261152	0.992 61159	7.3965 6E-06	0.66 292827	0.6629	1.9592 4E-05	0.91 991897	0.9199	6.0411 6E-06	0.99 999854	1.0000	0.0001 59209
14	0.99 620363	0.996 20365	1.7444 5E-06	0.69 178463	0.6917 84321	4.4652 4E-05	0.92 759675	0.9275 96769	2.0964 1E-06	0.99 999832	0.9999 95643	0.0002 67691
15	0.99 998454	0.999 98471	1.7363 4E-05	0.50 848532	0.5084 8538	1.1800 7E-05	0.46 889199	0.4688 91915	1.5898 7E-05	0.99 999967	1.0000 02438	0.0002 76809
16	0.99 417405	0.994 17406	9.1689 9E-07	0.66 582584	0.6658 25861	3.1743 8E-06	0.89 755739	0.8975 57285	1.1726 7E-05	0.99 999860	0.9999 98927	3.2678 6E-05
17	0.99 598421	0.995 98418	3.4862 1E-06	0.66 156781	0.6615 6763	2.7198 7E-05	0.83 467963	0.8346 79771	1.6924 7E-05	0.99 999899	0.9999 91816	0.0007 17377
18	0.99 598464	0.995 98473	9.4846 E-06	0.66 296661	0.6629 66435	2.6400 1E-05	0.84 081964	0.8408 19619	2.5428 5E-06	0.99 999896	0.9999 98165	7.9461 7E-05
19	0.99 293544	0.992 93538	6.3219 5E-06	0.60 360838	0.6036 08335	7.4216 8E-06	0.76 177312	0.7617 73207	1.1432 7E-05	0.99 999941	1.0000 051	0.0005 6905
20	0.99 452331	0.994 52322	8.5680 5E-06	0.69 138412	0.6913 83814	4.4234 1E-05	0.96 728703	0.9672 86852	1.8424 6E-05	0.99 999777	0.9999 93657	0.0004 11303
21	0.97 945750	0.979 45756	5.8613 3E-06	0.68 586104	0.6858 61147	1.5528 1E-05	0.98 519203	0.9851 92065	3.5412 E-06	0.99 999720	0.9999 97376	1.7606 4E-05
22	0.99 714974	0.997 14987	1.2987 4E-05	0.65 865236	0.6586 51966	5.9853 E-05	0.79 329972	0.7932 99452	3.3805 4E-05	0.99 999921	0.9999 90119	0.0009 09115
23	0.99 715210	0.997 15225	1.4755 4E-05	0.64 682292	0.6468 22903	2.5735 8E-06	0.76 535319	0.7653 53127	8.2245 1E-06	0.99 999934	0.9999 9631	0.0003 02955
24	0.99 480156	0.994 80172	1.6154 7E-05	0.68 407484	0.6840 74791	7.2087 8E-06	0.94 132558	0.9413 25467	1.1988 4E-05	0.99 999819	0.9999 98943	7.5284 7E-05
25	0.99 480036	0.994 80046	1.0147 9E-05	0.71 243049	0.7124 30344	2.0511 2E-05	0.98 911313	0.9891 12636	4.9908 3E-05	0.99 999646	0.9999 91872	0.0004 58803
26	0.99 374147	0.993 74188	4.1596 6E-05	0.68 274421	0.6827 44596	5.6489 4E-05	0.95 445099	0.9544 50793	2.0658 3E-05	0.99 999801	1.0000 04907	0.0006 8969
27	0.99 997908	1.027 93771	2.7959 21372	0.48 447968	0.5472 16221	12.949 26162	0.47 540622	0.6918 33891	45.524 78745	0.99 999955	0.9999 78614	0.0020 93558
28	0.99 512444	0.986 22294	0.8945 11427	0.63 712502	0.6722 26708	5.5093 87721	0.80 464434	0.8963 53984	11.397 538	0.99 999919	1.0000 00887	0.0001 69674
29	0.99 512405	0.995 12407	1.9188 3E-06	0.63 991017	0.6399 10092	1.2213 8E-05	0.81 721122	0.8172 11054	2.0327 8E-05	0.99 999912	1.0000 00337	0.0001 21721
30	0.90 494225	0.904 94238	1.4733 1E-05	0.72 598419	0.7259 84198	1.1297 3E-06	0.99 691116	0.9969 11129	3.1128 E-06	0.99 999055	0.9999 85868	0.0004 68251
31	0.99 265084	0.992 65083	1.2392 8E-06	0.61 655034	0.6165 50465	2.0197 5E-05	0.80 232153	0.8023 21604	9.2452 E-06	0.99 999923	1.0000 02842	0.0003 61218

3	0.99	0.992	4.7200	0.63	0.6355	1.5800	0.86	0.8602	1.1327	0.99	1.0000	0.0001
2	236233	36233	9E-07	554650	466	8E-05	027274	72837	E-05	999888	00057	17741
3	0.99	0.995	5.2692	0.68	0.6862	2.6391	0.94	0.9427	4.5458	0.99	0.9999	0.0001
3	518573	18568	3E-06	624756	47379	9E-05	275243	52434	4E-07	999815	96241	90894
3	0.99	0.994	2.3254	0.67	0.6741	1.5626	0.91	0.9151	9.4790	0.99	1.0000	0.0001
4	420219	20242	6E-05	410143	01535	7E-05	514051	40423	3E-06	999853	00247	71708
3	0.99	0.999	6.7035	0.50	0.5072	7.5587	0.48	0.4850	2.5098	0.99	0.9999	0.0015
5	997537	97544	4E-06	729516	95543	9E-05	507511	75232	6E-05	999933	83466	86392
3	0.99	0.995	1.4534	0.61	0.6183	1.3564	0.74	0.7429	5.7416	0.99	0.9999	8.2231
6	536609	36623	E-05	832040	20408	4E-06	297757	77613	E-06	999946	99468	3E-07
3	0.99	1.001	0.4468	0.64	0.6066	6.4375	0.75	0.6324	16.517	0.99	0.9999	0.0012
7	723322	6891	2391	835372	1581	21526	758650	52698	42768	999937	87013	35665
3	0.99	0.999	7.1147	0.47	0.4753	6.5962	0.44	0.4480	8.6586	0.99	0.9999	6.4981
8	998994	99001	4E-06	533770	38014	7E-05	800440	04788	8E-05	999985	992	7E-05
3	0.99	0.993	3.1380	0.68	0.6863	7.7418	0.96	0.9654	7.5504	0.99	1.0000	0.0004
9	363642	63611	6E-05	632300	22469	7E-05	543489	34963	6E-06	999783	02522	69205
4	0.99	0.994	0.0853	0.65	0.6651	2.2873	0.87	0.9154	4.5856	0.99	1.0000	0.0002
0	338067	22844	42012	024324	16284	04608	532777	67424	71205	999879	01076	28647
4	0.88	0.880	6.3024	0.73	0.7324	1.4503	0.97	0.9742	9.0409	0.99	0.9999	0.0003
1	075953	75959	6E-06	241413	14236	E-05	425385	53762	1E-06	998819	84894	29634
4	0.99	0.992	5.8961	0.59	0.5963	4.7837	0.74	0.7467	2.1607	0.99	1.0000	0.0004
2	282073	82079	7E-06	633117	31199	5E-06	678327	83431	6E-05	999947	04431	96075
4	0.96	0.969	2.1888	0.69	0.6990	2.3877	0.99	0.9943	8.5581	0.99	0.9999	0.0001
3	917920	17922	3E-06	900649	06507	1E-06	432388	23965	9E-06	999646	98099	63914
4	0.99	0.995	8.4338	0.62	0.6288	1.0844	0.77	0.7708	4.1598	0.99	1.0000	9.3625
4	551111	51119	4E-06	880052	00452	9E-05	087864	78319	5E-05	999935	00286	6E-05
4	0.99	0.999	1.8250	0.48	0.4818	6.7047	0.45	0.4587	7.3762	0.99	0.9999	1.3202
5	993778	93796	4E-05	183491	35233	9E-05	879236	92698	2E-05	999976	99628	8E-05
4	0.99	0.988	1.1437	0.47	0.5019	5.8643	0.45	0.5009	10.892	0.99	0.9999	6.7423
6	999004	55281	34366	414177	46944	16535	173489	39713	41151	999983	99156	3E-05
4	0.99	0.996	1.1525	0.66	0.6674	5.0212	0.81	0.8164	2.9585	0.99	0.9999	0.0007
7	698700	98701	9E-06	745061	50275	3E-05	643353	33288	6E-05	999908	91871	20897
4	0.99	1.003	0.3299	0.49	0.6412	30.143	0.45	0.8324	83.545	0.99	0.9999	0.0001
8	998954	28943	92052	275626	91408	73633	356504	97911	43167	999983	9877	05979
4	0.91	0.915	5.4351	0.72	0.7258	1.8301	0.99	0.9944	1.3883	0.99	0.9999	0.0002
9	543607	43612	6E-06	581046	10473	2E-06	445500	55138	3E-05	999208	89599	48062
5	0.98	0.989	6.4547	0.67	0.6737	5.7195	0.99	0.9949	1.2000	0.99	0.9999	0.0002
0	936897	36891	8E-06	378873	88734	8E-07	495199	51871	5E-05	999741	95202	20843
	Promedio de X_HE		0.171125063	Promedio X_NMP1		1.386643531	Promedio X_AE		3.759376	Promedio X_NMP2		0.000707084

ANEXO G: RESULTADOS DEL ANÁLISIS ANOVA









esPOCH

**Dirección de Bibliotecas y
Recursos del Aprendizaje**

**UNIDAD DE PROCESOS TÉCNICOS Y ANÁLISIS BIBLIOGRÁFICO Y
DOCUMENTAL**

REVISIÓN DE NORMAS TÉCNICAS, RESUMEN Y BIBLIOGRAFÍA

Fecha de entrega: 30 / 05 / 2023

INFORMACIÓN DEL AUTOR/A (S)
Nombres – Apellidos: Denisse Yajaira Chicaiza Sagal
INFORMACIÓN INSTITUCIONAL
Facultad: Ciencias
Carrera: Ingeniería Química
Título a optar: Ingeniera Química
f. Analista de Biblioteca responsable: Ing. Rafael Inty Salto Hidalgo



0763-DBRA-UTP-2023